

THÈSES

PRÉSENTÉES

A LA FACULTÉ DES SCIENCES DE L'UNIVERSITÉ DE PARIS

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ES-SCIENCES MATHÉMATIQUES

PAR

Jeanne-Marie LANORE

PREMIERE THESE

RECHERCHE D'UNE METHODE DE PONDERATION POUR LE TRAITEMENT
PAR LA METHODE DE MONTE-CARLO
DE LA PENETRATION PROFONDE DES NEUTRONS

DEUXIEME THESE

Propositions données par la Faculté

Soutenues le 13 novembre 1970 devant la Commission d'Examen

MM. R. FORTET

Président

R. SCHUTTLER
VIGNES

Examineurs

P. LAFORE

Membre Invité

THÈSES

PRÉSENTÉES

A LA FACULTÉ DES SCIENCES DE L'UNIVERSITÉ DE PARIS

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ES-SCIENCES MATHÉMATIQUES

PAR

Jeanne-Marie LANORE

PREMIERE THESE

RECHERCHE D'UNE METHODE DE PONDERATION POUR LE TRAITEMENT
PAR LA METHODE DE MONTE-CARLO
DE LA PENETRATION PROFONDE DES NEUTRONS

DEUXIEME THESE

Propositions données par la Faculté

Soutenues le 13 novembre 1970 devant la Commission d'Examen

MM. R. FORTET

Président

R. SCHUTTLER
VIGNES

Examineurs

P. LAFORE

Membre Invité

THESIS

A LA FACULTE DES SCIENCES
DE L'UNIVERSITE DE PARIS

LE GRADE DE DOCTEUR EN SCIENCES MATHÉMATIQUES



PLAN GENERAL

I - INTRODUCTION

II - THEORIE - GENERALITES

II.1 - Tirages au hasard - séries de nombres aléatoires

II.2 - Jeux analogues

II.3 - Jeux non analogues

A - Fonction d'importance

B - Jeu modifié

C - Choix de la fonction d'importance - variance nulle

D - Exemples de jeux à variance nulle

E

F - Jeu à variance minimale

III - CAS D'UN CORPS A SECTION EFFICACE CONSTANTE

III.1 - Géométrie plane - neutrons monocinétiques - chocs isotropes

III.2 - Chocs anisotropes

III.3 - Ralentissement dans un milieu lourd

III.4 - Géométrie sphérique

III.5 - Réalisation - aspect des résultats

III.6 - Gain de la méthode

IV - CAS REEL : MILIEU HOMOGENE DE SECTION EFFICACE QUELCONQUE

IV.1 - Section efficace totale variable

IV.2 - Chocs inélastiques

IV.3 - Chocs sur les corps légers (hydrogène)

IV.4 - Mélange de corps

IV.5 - Trous de section efficace

IV.6 - Réalisation - résultats - étude de la variance

IV.7 - Exemples concrets - comparaison avec d'autres méthodes

V - CAS DE PLUSIEURS MILIEUX DE COMPOSITION DIFFERENTE

V.1 - Traitement direct

V.2 - Remaniement de la population sur une frontière

V.3 - Biaisage tenant compte des milieux voisins

V.4 - Exemples

VI - DETECTION D'HISTOIRES EXCEPTIONNELLES - EXEMPLE

VII - MAJORATION DE L'ECART QUADRATIQUE

VIII - EXTENSION POSSIBLE A DES GEOMETRIES TRIDIMENSIONNELLES

Exemple : cas d'un hélicoïde

IX - UTILISATION DE LA METHODE POUR TRAITER LE PROBLEME ADJOINT

X - CONCLUSION

Annexe I - Description rapide des divers programmes écrits au cours de cette étude

Annexe II - Détails de programmation

RECHERCHE D'UNE METHODE DE PONDERATION POUR LE TRAITEMENT PAR LA METHODE DE MONTE-CARLO DE LA PENETRATION PROFONDE DES NEUTRONS

REMERCIEMENTS

INTRODUCTION

Les méthodes de Monte Carlo semblent avoir une portée plus intuitive que les méthodes analytiques.

Au moment de la publication de ce mémoire, je tiens à remercier ceux qui m'ont aidée dans mes premières études de statistique et de neutronique et dont les conseils m'ont permis d'élaborer et de terminer cette étude.

Tout d'abord le Professeur R. FORTET pour l'intérêt qu'il a bien voulu porter à ce travail.

Les Professeurs J. ARSAC et R. SCHUTTLER dont les conseils et les critiques ont grandement contribué à améliorer la présentation de ce mémoire.

Le Professeur VIGNES qui a accepté de s'intéresser à cette étude.

Monsieur J. HOROWITZ, Directeur des Piles Atomiques, qui a bien voulu m'accueillir au Commissariat à l'Energie Atomique.

Monsieur J. BOURGEOIS; Chef du Département d'Etudes de Piles qui m'a permis d'effectuer ce travail dans les meilleures conditions.

Monsieur P. LAFORE, Chef du Service de Protection de Piles qui s'est constamment intéressé à cette étude et dont les conseils m'ont grandement aidée.

Monsieur J. SOULE avec qui j'ai eu de précieuses discussions et Monsieur J. RASTOIN qui s'est particulièrement intéressé aux applications pratiques de la méthode de calcul. Le personnel du Service d'Etudes de Protections de Piles qui a participé à cette étude, en particulier Monsieur C. DEVILLERS pour son intérêt et ses conseils, Madame B. NIMAL et Messieurs S. KATZ et J.C. NIMAL pour leur précieuse collaboration.

Digitized by the Internet Archive
in 2026

RECHERCHE D'UNE METHODE DE PONDERATION POUR LE TRAITEMENT PAR LA METHODE DE MONTE-CARLO DE LA PENETRATION PROFONDE DES NEUTRONS

I - INTRODUCTION

Les méthodes de Monte Carlo semblent avoir une origine plus intuitive que théorique. En effet lorsque l'on cherche à calculer une grandeur qui est la valeur moyenne d'une quantité résultant d'un processus aléatoire répété un nombre considérable de fois, on peut chercher à simuler l'expérience en créant un certain nombre d'épreuves conformément aux lois de probabilité du phénomène et en prenant la moyenne des résultats ainsi obtenus.

Il est évident que ce procédé n'a de sens que si la variance est suffisamment faible. L'écart type σ sur N épreuves varie sensiblement en $\frac{1}{\sqrt{N}}$, il faut donc réaliser un nombre suffisant d'épreuves, sans toutefois que le temps de calcul soit prohibitif. La rapidité des calculateurs électroniques a donné beaucoup d'intérêt aux méthodes de Monte Carlo, cependant toutes les améliorations de ces méthodes visent à réduire ce temps de calcul pour une variance donnée, ou à diminuer la variance pour un même temps de calcul, ce qui est équivalent [1] [2] [3] [13].

Cas de la propagation des neutrons

Le problème de la propagation des neutrons dans la matière se prête particulièrement à un calcul par la méthode de Monte Carlo. En effet les processus microphysiques qui entrent en jeu ont un caractère aléatoire, régi par des lois de probabilité discrètes ou continues que l'on connaît, et les grandeurs macroscopiques que l'on cherche à calculer (flux neutronique à la sortie d'un écran de protection, réponse d'un détecteur par exemple) ne sont que des valeurs moyennes résultant de ces processus répétés un très grand nombre de fois.

Nous allons considérer le cas de populations de neutrons dans un état stationnaire, dont les histoires aléatoires sont régies par les lois physiques, elles-mêmes obtenues à partir des propriétés physiques du neutron et des noyaux, avec les hypothèses suivantes :

- Les seules interactions traitées sont celles des neutrons avec les noyaux atomiques (on néglige les interactions des neutrons entre eux).
- Entre deux chocs les neutrons se déplacent en ligne droite avec une vitesse constante.

- le nombre de chocs moyen par unité de longueur est constant dans un matériau donné (les dimensions du noyau étant très faibles par rapport à celles des atomes).

Cette constante Σ_T est la section efficace totale macroscopique du milieu, elle dépend du matériau traversé et de l'énergie du neutron.

Ces considérations conduisent à l'équation intégral-différentielle de Boltzmann, puis, dans le cas des systèmes stationnaires, à l'équation intégrale que nous cherchons à résoudre :

$$\varphi(x) = \int K(x' \rightarrow x) \varphi(x') dx' + S(x)$$

x représente les coordonnées du neutron dans l'espace des phases, $\varphi(x)$ la densité de flux neutronique, $K(x' \rightarrow x)$ le noyau de la transformation permettant de passer de l'état x' à l'état x , et $S(x)$ les sources au point x .

Nous nous intéressons ici particulièrement à la propagation des neutrons dans les protections des réacteurs, il s'agira donc de traiter le cas de très grandes épaisseurs de matériau, et donc de très fortes atténuations.

Nous allons d'abord rappeler brièvement comment cette équation peut être résolue par une méthode de Monte Carlo, puis quelles améliorations on a pu y apporter pour réduire la variance, et même quelques exemples théoriques de jeux à variance nulle.

Puis nous exposerons la méthode que nous proposons pour obtenir une variance minimale, d'abord rigoureusement dans un cas théorique, puis en compliquant progressivement le problème, dans le cas général.

Nous décrirons sa réalisation pratique, et ensuite des exemples d'applications variées mettront en évidence son efficacité.

II - THEORIE - GENERALITES

La première étape fut de simuler l'expérience en créant des jeux analogues aux processus physiques, en utilisant les probabilités naturelles de chaque évènement. Nous verrons ensuite qu'il est possible de créer des jeux non analogues, statistiquement équivalents aux jeux analogues mais permettant de réduire la variance.

II.1 - Tirages au hasard - séries de nombres aléatoires

Voyons d'abord comment on peut effectuer le tirage d'un évènement selon une loi de probabilité donnée.

Probabilités discrètes

Supposons par exemple que lors d'un choc un neutron a une probabilité p_1 d'être absorbé, p_2 de subir un choc élastique et p_3 de subir un choc inélastique ($p_1 + p_2 + p_3 = 1$).

Tirons au hasard un nombre A compris entre 0 et 1 :

- Si $A < p_1$ il y a absorption
- Si $p_1 < A < p_1 + p_2$ le choc est élastique
- Si $p_1 + p_2 < A < 1$ le choc est inélastique

On peut ainsi respecter la fréquence de chaque évènement.

Probabilités continues

Supposons qu'une grandeur x aléatoire soit répartie selon une loi de probabilité $p(x)$, c'est-à-dire que la probabilité pour que x soit compris entre x et $x + dx$ est $p(x) dx$.

Si x_1 et x_2 sont les valeurs extrêmes possibles

on a :

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = 1$$

On tire un nombre A au hasard entre 0 et 1, la valeur X de la variable x correspondante est alors donnée par :

$$\int_{x_1}^X p(x) dx = A$$

Si la fonction $p(x)$ admet une primitive connue, on obtient X. L'exemple le plus courant est celui de la distance l parcourue entre 2 chocs. Si Σ_T est la section efficace totale du milieu, la probabilité pour que le choc suivant ait lieu dans l'intervalle $l, l + dl$ est $\Sigma_T e^{-\Sigma_T l} dl$

On obtient alors
$$\int_0^L \Sigma_T e^{-\Sigma_T l} dl = A$$

$$\text{d'où } L = -\frac{1}{\Sigma_T} \text{Log}(1 - A)$$

Si l'on ne connaît pas de primitive de $p(x)$, on peut alors remplacer l'intégrale par une somme discrète et l'on est ramené au cas précédent.

Séries de nombres aléatoires

Comme le montrent les exemples ci-dessus, il est nécessaire de pouvoir obtenir un nombre au hasard compris entre 0 et 1, et ceci un très grand nombre de fois. On a d'abord cherché à établir des tables de tels nombres, mais il faudrait alors les conserver en mémoire dans la machine, ce qui prendrait une place considérable. On a donc recours à des méthodes permettant de fabriquer des nombres au fur et à mesure. Celle que nous utilisons est la suivante : étant donné un entier A très grand, on fait le produit de A par un nombre premier quelconque B modulo 2^{32} , on obtient un nombre B', puis on fait le produit B'xA modulo 2^{32} , d'où B'' et ainsi de suite. Le nombre B', B'' etc... divisés par $(2^{32}-1)$ donnent la suite cherchée. La répartition n'est donc pas parfaitement uniforme, mais un choix judicieux de A, appuyé sur de nombreux tests, permet de s'en rapprocher beaucoup. Cette méthode permet de plus de changer toute la série de nombres aléatoires en changeant uniquement le nombre B d'initialisation, ce qui est très utile pour les études de variance.

II.2 - Jeux analogues

Reprenons l'équation de Boltzmann :

$$\Psi(x) = \int \Psi(x') K(x' \rightarrow x) dx' + S(x) \quad (1)$$

C'est une équation intégrale du type de Fredholm.

Posons
$$k(x) = \int K(x \rightarrow x') dx'$$

$$\text{et } \|K\| = \max(k(x))$$

Dans le cas où $\|K\| < 1$ cette équation a une solution quel que soit $S(x)$, et cette solution est développable en série de Neumann :

$$\psi_0(x) = S(x)$$

$$\psi_p(x) = \int \psi_{p-1}(x) K(x' \rightarrow x) dx'$$

La série ainsi définie converge uniformément et :

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \psi_1(x) + \dots + \psi_p(x) + \dots$$

Nous nous intéressons le plus souvent à une réponse I caractérisée par une fonction $g(x)$ sommable :

$$I = \int g(x) \psi(x) dx$$

On démontre que la série de terme général :

$$I_p = \int g(x) \psi_p(x) dx$$

converge et que sa somme est la réponse I .

Voyons maintenant comment on peut construire un jeu permettant de calculer I .

On cherche à calculer une somme partielle :

$$J_n = I_0 + I_1 + \dots + I_n$$

(J_n tend vers I quand $n \rightarrow \infty$).

Une histoire est définie par la suite des événements

$x_0, x_1, \dots, x_n$ que nous appellerons la chaîne γ_n .

x_0 est tiré avec la densité $P_0(x) = S(x) / \int S(x) dx$

x_p est tiré avec la densité $P(x_{p-1} \rightarrow x_p)$ une fois x_{p-1} fixé.

avec $P(x_{p-1} \rightarrow x_p) = K(x_{p-1} \rightarrow x_p) / k(x_{p-1})$

La probabilité d'avoir une chaîne γ_n est donc :

$$dP(\gamma_n) = P_0(x_0) dx_0 \prod_{p=0}^{n-1} P(x_p \rightarrow x_{p+1}) dx_{p+1}$$

Définissons un estimateur $\hat{I}_p(\gamma_n)$ qui sera la contribution du $p^{\text{ième}}$ choc de la chaîne γ_n à la réponse I :

$$\hat{I}_0(\gamma_n) = g(x_0)$$

$$\hat{I}_p(\gamma_n) = k(x_0) k(x_1) \dots k(x_{p-1}) g(x_p)$$

Si $\hat{J}_n(\gamma_n) = J_0(\gamma_n) + \dots + \hat{I}_n(\gamma_n)$ on démontre facilement que l'espérance mathématique de $\hat{J}_n$ est J_n .

Ceci peut s'exprimer en termes concrets de la façon suivante : on suit l'histoire d'un neutron, chaque évènement x_p représentant les coordonnées d'un choc dans l'espace des phases.

La simple simulation de l'expérience conduit à donner à chaque choc une probabilité $k(x_p)$ pour que le neutron poursuive son histoire, sinon il est absorbé. Et tant que dure l'histoire on encaisse la contribution $g(x_p)$ de chaque choc x_p , ce qui est statistiquement équivalent à $\hat{J}_n(x_p)$.

Mais dans les problèmes courants de protection on a souvent des atténuations considérables (10^{-6} par exemple), ce qui conduirait à traiter un nombre de neutrons tout à fait prohibitif, puisqu'un seul neutron en moyenne atteindrait le point de mesure pour une population initiale de 10^6 neutrons.

Pour obtenir une variance acceptable il faudrait traiter 10^8 ou 10^9 histoires, soit au minimum 10^{10} chocs. Or en 10 minutes de machines IBM 360/91, ce qui est un calcul déjà long, on traite environ 10^6 chocs. On voit donc que de simples améliorations de la programmation ne pourront jamais faire gagner un tel facteur, on ne traitera correctement que des atténuations de 10^{-2} ou 10^{-3} au plus. Par contre au voisinage de la source la variance serait extrêmement faible à cause du grand nombre d'histoires situées dans cette région. On va donc chercher à agir sur la méthode elle-même afin de diminuer la variance sur certaines réponses au détriment de celles pour lesquelles cette variance était inutilement faible.

Fractionnement

Le procédé le plus simple pour remédier à la disparition trop rapide de la population de neutrons est le fractionnement (désigné aussi par le mot anglais "splitting").

Chaque neutron est affecté d'un poids π , et il est possible de remplacer, à certaines étapes de son histoire, un neutron de poids π par N neutrons de poids $\frac{\pi}{N}$, chacun étant ensuite suivi indépendamment (mais il existera une corrélation entre eux). La contribution d'un neutron pondéré à la réponse est alors le produit de son poids par $g(x_p)$. On peut ainsi obtenir des histoires beaucoup plus longues.

Roulette russe

La méthode précédente peut conduire à encaisser en un même point des quantités d'ordre de grandeur très différent. Il faut donc éliminer les neutrons de poids très faible par rapport aux autres pour ne pas suivre inutilement des histoires de contribution négligeable. On utilise alors le procédé inverse du fractionnement qui est la roulette russe : on donne au neutron une probabilité p de poursuivre son histoire avec un poids $\frac{\pi}{p}$, sinon il est tué.

Le fractionnement et la roulette russe peuvent être utilisés de façons diverses, à chaque choc, ou à la traversée de certaines surfaces, ou en atteignant certaines énergies, souvent de façon semi-empirique. (Le principe de cette méthode, ainsi que les termes "splitting" et "roulette russe" sont dus à J. Von Neumann et S. Ulam).

Le gain ainsi obtenu est très variable suivant le type de problème et la méthode d'application. Cependant dans bien des cas il est impossible d'obtenir un résultat satisfaisant, car au-delà d'une certaine distance ou d'une certaine atténuation la variance est beaucoup trop grande. Là encore une programmation très élaborée ne fera jamais gagner les facteurs 10^3 ou 10^4 que l'on cherche parfois.

Pour progresser il faut agir sur les tirages eux-mêmes, et ainsi apparaît la nécessité d'utiliser des jeux non analogues.

II.3 - Jeux non analogues

Le but est d'obtenir des jeux statistiquement équivalents aux jeux naturels quant au résultat, mais avec une variance réduite, ceci en favorisant à priori les histoires "intéressantes", c'est-à-dire les histoires ayant une contribution importante au résultat [9] [10] .

A - Fonction d'importance

L'équation (1) peut être transformée à l'aide d'une fonction arbitraire $A(X)$ positive et non nulle que nous appellerons la fonction importance.

Si l'on multiplie chaque terme par le facteur :

$$\frac{A(X)}{\int A(X') S(X') dX'}$$

En posant :
$$\Psi'(X) = \frac{\Psi(X) A(X)}{\int A(X') S(X') dX'}$$

L'équation (1) devient :

$$\Psi'(X) = \int K(X' \rightarrow X) \frac{A(X)}{A(X')} \Psi'(X') dX' + \frac{S(X) A(X)}{\int S(X') A(X') dX'} \quad (2)$$

L'équation (2) a la même forme que (1) avec une source modifiée :

$$S^*(X) = \frac{S(X) A(X)}{\int S(X') A(X') dX'} \quad \text{normée}$$

et un noyau modifié $K^*(X' \rightarrow X) = K(X' \rightarrow X) \times \frac{A(X)}{A(X')}$

Cette équation peut donc être résolue par la méthode de Monte Carlo en utilisant les probabilités modifiées, à condition toutefois que $\|K^*\| < 1$.

B - Jeu modifié

X_0 est tiré avec la probabilité $P_0^*(X_0)$:

$$P_0^*(X) = \frac{S(X) A(X)}{\int S(X) A(X) dX} = \frac{S(X) A(X)}{B}$$

X_{n-1} étant fixé, X_n est tiré avec la probabilité $P^*(X_{n-1} \rightarrow X_n)$

$$= K^* \frac{(X_{n-1} \rightarrow X_n)}{k_{n-1}^*} \text{ avec } K^*(X_{n-1} \rightarrow X_n) = K(x_{n-1} \rightarrow x_n) \cdot \frac{A(X_n)}{A(X_{n-1})}$$

et $k_{n-1}^* = \int_D K^*(X_{n-1} \rightarrow X_n)$

La probabilité d'apparition de la chaîne $\mathbf{Y}_N^*$ est :

$$dP^*(\mathbf{Y}_N^*) = P_0^*(X_0) \prod_{n=0}^{N-1} P^*(X_n \rightarrow X_{n+1}) dX_0 dX_1 \dots dX_N$$

Considérons comme précédemment un estimateur choc par choc.

La contribution du $p^{\text{ième}}$ choc de la chaîne $\mathbf{Y}_N^*$ est :

$$\begin{aligned} \hat{l}_p^*(\mathbf{Y}_N^*) &= \frac{P_0(X_0) \prod_{n=0}^{p-1} K(X_n \rightarrow X_{n+1})}{P_0^*(X_0) \prod_{n=0}^{p-1} P^*(X_n \rightarrow X_{n+1})} g(X_p) \\ &= \frac{B}{A(X_0)} \prod_{n=0}^{p-1} k(x_n) \frac{A(X_{n+1})}{A(X_n)} g(X_p) \end{aligned}$$

et $\hat{J}_N^x = \hat{l}_0^*(\mathbf{Y}_N^*) + \dots + \hat{l}_N^*(\mathbf{Y}_N^*)$

On peut démontrer que l'espérance mathématique de $\hat{J}_n^x$ est J_N . L'estimateur est donc équivalent à celui du jeu analogue pour la moyenne du résultat, mais pas pour la variance, celle-ci dépendant de $A(x)$.

C - Choix de la fonction d'importance - variance nulle

Le choix idéal de la fonction $A(x)$ serait celui pour lequel les contributions de toutes les chaînes seraient rigoureusement égales, la variance serait alors nulle, et une seule histoire donnerait le résultat.

Ceci ne peut être réalisé que si l'on cherche une réponse unique avec un estimateur de forme particulière.

En effet il faut que le nombre d'encaissements au cours d'une histoire soit aussi sans variance, il faut donc :

1 - qu'une histoire sans contribution au résultat soit impossible.

2 - que le nombre de contributions soit constant.

Dans le cas de l'encaissement choc par choc décrit ci-dessus la variance nulle ne peut être envisagée que sur l'encaissement au bout d'un nombre donné de chocs (flux de nième choc).

Par contre si l'on encaisse le résultat uniquement quand une histoire se termine (estimateur de dernier choc), et qu'il n'existe pas d'histoire sans contribution, on peut, comme nous allons le voir, calculer la fonction d'importance d'un jeu à variance nulle.

D - Variance nulle sur un estimateur de dernier choc (cas où chaque histoire donne une contribution et une seule)

L'estimateur choisi est de la forme :

$$\hat{I}_{(n)} = \frac{P_o(x_o) K(x_o \rightarrow x_1) K(x_1 \rightarrow x_2) \dots g(x_n)}{P(\gamma_n) (1 - k(x_n)) \prod_{p=0}^{n-1} k(x_p)}$$

dans le cas d'un jeu analogue.

On peut montrer que l'espérance mathématique de $\hat{I}_n$ est la réponse totale I .

Pour un jeu biaisé on obtient :

$$\hat{I}_{(n)}^* = \frac{P_o(x_o) K(x_o \rightarrow x_1) K(x_1 \rightarrow x_2) \dots K(x_{n-1} \rightarrow x_n) g(X_n)}{P^*(\gamma_n) (1 - k^*(x_n)) \prod_{p=0}^{n-1} k^*(x_p)}$$

$$\text{or } P^*(Y_n) = P_o^*(X_o) \prod_{p=0}^{n-1} \frac{K^*(x_p \rightarrow x_{p+1})}{k^*(x_p)} \text{ et } K^*(x_p \rightarrow x_{p+1}) = \frac{A(x_{p+1})}{A(x_p) K(x_p \rightarrow x_{p+1})}$$

$$\text{d'où } \hat{I}^*(n) = \frac{P_o(x_o) A(x_1)}{P^*(x_o)} \cdot \frac{g(x_n)}{1 - k^*(x_n)} \cdot \frac{1}{A(x_n)}$$

pour que cette expression soit indépendante de n il faut que :

$$\frac{g(x_n)}{1 - k^*(x_n)} \cdot \frac{1}{A(x_n)} = 1$$

$$\text{soit } A(x_n) = \int K(x_{n-1} \rightarrow x_n) \cdot A(x_{n-1}) + g(x_n) \quad (3)$$

L'importance doit donc être solution d'une équation adjointe de (1) avec la réponse $g(x)$ comme source [4].

Mais un tel estimateur est rarement utilisé, en effet en général on recherche simultanément plusieurs réponses à différentes distances de la source, et l'on désire tirer le plus d'informations possibles de chaque histoire, on préfère donc un estimateur choc par choc comme celui que nous avons défini précédemment.

E - Variance nulle sur la contribution partielle du nième choc. Réf. [14] [15] [20].

(C'est la contribution partielle des chaînes de longueur $N \geq n$, leur contribution totale étant la somme de ces valeurs quand n varie de 1 à N). On peut obtenir une variance rigoureusement nulle sur la contribution du nième choc à une réponse donnée

$$I = \int \Psi(x) \cdot g(x)_o.$$

Définissons $A(x)$ de la façon suivante :

$$A_o^n(x) = g(x)$$

$$A_{p-1}^n(x) = \int K(x \rightarrow x') A_p^n(x') dx'$$

$$\text{d'où } P_o^*(x_o) = \frac{P_o(x_o) A_o^n(x_o)}{\int P_o(x_o) A_o^n(x_o) dx_o}$$

$$\text{et } P^*(x_p \rightarrow x_{p+1}) = K(x_p \rightarrow x_{p+1}) \frac{A_{p+1}^n(x_{p+1})}{A_p^n(x_p)}$$

la fonction $A(x)$ dépend à la fois du numéro du choc traité (p) et du numéro (n) du choc pour lequel on veut une variance nulle. On montre alors facilement que l'estimateur $I_n^*(Y_N^*)$ a une valeur constante $= I_n$.

Ce résultat n'a que peu d'intérêt du point de vue pratique.

F - Jeu à variance minimale pour un estimateur choc par choc. Réf. [22] [23].

Le nombre N d'encaissements étant aléatoire on aura toujours au minimum une variance $\sigma = \frac{1}{\sqrt{N}}$.

Pour n'observer que cette variance il faut que les N encaissements soient égaux et indépendants, c'est-à-dire qu'ils doivent être dus à des histoires différentes, sans corrélation entre elles. Il faut donc éviter d'avoir recours aux procédés de remaniement par fractionnement.

Nous avons alors cherché quelle forme donner à l'importance $A(X)$ pour que l'encaissement ne dépende que de X : en un point de l'espace des phases les encaissements seront rigoureusement égaux, quelle que soit l'histoire du neutron.

Reprenons l'estimateur du jeu biaisé :

$$\hat{I}_p^*(Y_N^*) = \frac{B}{A(X_o)} \prod_{n=0}^{p-1} k(x_n) \frac{A(X_{n+1})}{A(X_n)} \cdot g(X_p)$$

Cette expression ne pourrait être indépendante de p que si l'on avait :

$$\text{Soit } k(x_n) = 1 \quad \text{c'est-à-dire } \int K(x \rightarrow y) dy = 1$$

$$\text{Soit } k(x_n) \frac{A(x_{n+1})}{A(x_n)} = 1 \quad \text{c'est-à-dire } \int K^*(x \rightarrow y) dy = 1$$

ces deux expressions étant en contradiction avec les hypothèses nécessaires pour la convergence de la série de Neumann, de telles solutions sont impossibles.

On peut alors utiliser la roulette russe à chaque choc en donnant au neutron une probabilité $k^*(x_n)$ de poursuivre son histoire. L'estimateur devient $\hat{I}_n^x = \frac{B}{A(x_p)} g(X_p)$ et ne dépend que de X .

Mais de nombreuses histoires s'arrêteront avant d'avoir contribué au résultat, ce qui est très gênant dans le cas des grandes pénétrations.

Faisons alors l'hypothèse que le domaine D dans lequel on cherche un résultat est fini (ce qui correspond aux problèmes pratiques), et que ce domaine est contenu dans le

domaine D' de définition du noyau K , c'est-à-dire que les neutrons ont une probabilité non nulle d'atteindre les points du domaine $D'-D$.

Il serait alors tout-à-fait intéressant que les histoires ne puissent s'arrêter que si l'on sort de D .

L'encaissement pourra alors être $\frac{Bg(x)}{A(x)}$ en tout point du domaine D et 0 dans $D'-D$ si $k^*(x)$ est égal à la probabilité pour que x se trouve dans D .

On obtient alors :

$$\int_D K^*(x \rightarrow y) = \frac{\int_D K^*(x \rightarrow y)}{\int_{D'} K^*(x \rightarrow y)}$$

$$\text{soit } \int_{D'} K^*(x \rightarrow y) = 1$$

$$\int_{D'} K^*(x \rightarrow y) \frac{A(x)}{A(y)} = 1$$

$$A(y) = \int_{D'} A(x) K(x \rightarrow y)$$

L'importance doit donc être solution de l'équation adjointe homogène dans le domaine D' . Et comme K^* est un noyau positif, si $D < D'$ on a nécessairement $\int_D K^* < \int_{D'} K^* = 1$ ce qui est conforme aux hypothèses.

Le domaine D' est déterminé par le noyau K (ce sont les points y pour lesquels $K(x \rightarrow y)$ est défini, x appartenant à D). Mais ce domaine peut être modifié éventuellement en modifiant le noyau K .

III - CAS D'UN MILIEU DE SECTION EFFICACE CONSTANTE

III.1 - Géométrie plane - Neutrons monocinétiques

Nous allons d'abord considérer le cas très simple de neutrons d'énergie constante (c'est le cas par exemple de neutrons ayant atteint l'énergie thermique), issus d'une source plane et se propageant dans un milieu homogène où les seules interactions possibles sont les chocs élastiques ou l'absorption.

Soit Σ_T la section efficace totale du milieu et Σ_S la section efficace élastique (nombre moyen de chocs élastiques par unité de longueur).

Nous allons chercher une solution pour la fonction d'importance de forme exponentielle :

$$A(\vec{x}) = A_0(\vec{x}) e^{\vec{k}(\vec{x} - \vec{x}_0)}$$

$\vec{k}$ étant un vecteur de direction fixe et x représentant les coordonnées géométriques du neutron.

Nous en déduisons le noyau modifié $K^* = K \cdot \frac{A(x')}{A(x)}$.

En écrivant que dans un milieu infini $\int K^* = 1$ nous constaterons qu'il existe une valeur de $\vec{k}$ et une seule vérifiant cette équation, ce qui démontrera l'existence et l'unicité du jeu à variance minimale tel que nous l'avons défini.

Calcul du noyau modifié :

$$K^*(x \rightarrow x') = K(x \rightarrow x') \cdot \frac{A(x')}{A(x)}$$

soit un axe Oz parallèle au vecteur $\vec{k}$.

La position du neutron est repérée par sa cote z sur l'axe Oz et le cosinus Υ de sa direction avec Oz :

$$\Upsilon = \vec{Mz'} \cdot \vec{Oz}$$

La fonction d'importance se réduit à $A(z) = e^{kz}$ si l'on choisit $A(0) = 1$.

Supposons que le neutron subisse un choc au point M . Il subit une déviation et sa direction après choc sera $\vec{MM'}$.

Posons $\vec{\gamma}' = \vec{MM'} \cdot \vec{Oz}$, φ angle des plans (Mz', Oz) et (MM', Oz)

$$\text{et } \vec{\mu} = \vec{Mz'} \cdot \vec{MM'}$$

Le choc suivant aura lieu en M' . Posons $MM' = \ell$ (pl. (1))

Le noyau $K(x \rightarrow x')$ traduisant le passage de M à M' a pour expression :

$$K(x \rightarrow x') dx' = \frac{\Sigma S}{2\pi} p(\mu) e^{-\Sigma_T \ell} d\ell d\mu d\varphi$$

Si $p(\mu)$ est la probabilité pour que μ soit situé dans l'intervalle $(\mu, \mu + d\mu)$.

D'où le noyau modifié $K^*(x \rightarrow x') = K(x \rightarrow x') \cdot \frac{A(x')}{A(x)} = K(x \rightarrow x') \frac{e^{k(z + \gamma' \ell)}}{e^{kz}}$

$$K^*(x \rightarrow x') dx' = \frac{\Sigma S}{2\pi} p(\mu) e^{-(\Sigma_T - k\gamma')\ell} d\ell d\mu d\gamma'$$

$$\text{avec } \gamma' = \gamma \mu + \sqrt{1 - \mu^2} \sqrt{1 - \gamma^2} \cos \varphi$$

Intégrons l'expression en ℓ jusqu'à une distance infinie :

$$\int_{\ell=0}^{\infty} K^*(x \rightarrow x') d\ell = \frac{-\Sigma_S p(\mu)}{2\pi (\Sigma_T - k\gamma')} \cdot \frac{\delta\varphi}{\delta\gamma'} d\mu d\gamma'$$

Puis sur γ'

$$\text{en posant } \gamma' = \mu\gamma + \sqrt{1 - \mu^2} \sqrt{1 - \gamma^2} \frac{1 - t^2}{1 + t^2}$$

$$\text{puis : } \operatorname{tg} [\theta(\gamma')] = \sqrt{\frac{\Sigma_T - k\gamma\mu + k\sqrt{1 - \mu^2}\sqrt{1 - \gamma^2}}{\Sigma_T - k\gamma\mu - k\sqrt{1 - \mu^2}\sqrt{1 - \gamma^2}}} t$$

on obtient :

$$\int_{-1}^{\gamma'} k^*(\mu, \gamma') d\mu d\gamma' = \frac{\Sigma_S p(\mu) d\mu}{\sqrt{\Sigma_T^2 - 2\Sigma_T k\gamma\mu + k^2(\gamma^2 + \mu^2 - 1)}} \left[\frac{\theta(\gamma') - \theta(-1)}{2\pi} \right]$$

Si l'on fait varier γ' de -1 à $+1$ alors $\psi_2 - \psi_1 = 2\pi$.

$$\text{et } k^*(\mu, \gamma) = \frac{\Sigma_S p(\mu) d\mu}{\sqrt{\Sigma_T^2 - 2\Sigma_T k\gamma\mu + k^2(\gamma^2 + \mu^2 - 1)}}$$

Pour effectuer l'intégrale en μ il est nécessaire de connaître la forme de $p(\mu)$.

Nous allons étudier successivement le cas isotrope où $p(\mu)$ est une constante puis le cas général anisotrope.

Cas du choc isotrope dans le système du laboratoire

$$p(\mu) = 1/2$$

On peut alors intégrer aussi sur μ :

$$\text{en posant } \text{sh} \left[\psi(\mu) \right] = \frac{\mu - \frac{\Sigma_T \Upsilon}{k}}{\sqrt{\frac{\Sigma_T^2}{k^2} - 1} \sqrt{1 - \Upsilon^2}}$$

$$\text{on obtient } \int_{-1}^{\mu} K^*(\mu, \Upsilon) d\mu = \frac{\Sigma_S}{2k} \left[\psi(\mu) - \psi(-1) \right] = \frac{\Sigma_S}{2k} \text{Log} \left| \frac{\Sigma_T + k}{\Sigma_T - k} \right|$$

Et la condition $\int K^* = 1$ donne :

$$\frac{\Sigma_S}{2k} \text{Log} \left| \frac{\Sigma_T + k}{\Sigma_T - k} \right| = 1$$

k est donc donné par la formule de Placzek. Dans le cas isotrope monocinétique la solution est entièrement analytique, le nombre de neutrons pourra rester rigoureusement constant.

On peut donc opérer de la façon suivante :

On connaît k et Υ .

On tire un nombre ψ au hasard qui représentera $\psi(\mu)$ on en déduit μ par la formule.

On tire un autre nombre qui représentera $\varnothing(\Upsilon')$ et on en déduit Υ' .

On tire un 3ème nombre, et on en déduit ℓ qui a la répartition :

$$(\Sigma_T - k \Upsilon') e^{-(\Sigma_T - k \Upsilon) \ell}$$

On voit donc qu'à partir du 1er choc on se trouve dans le cas idéal où aucun calcul ne sera inutile (jamais de roulette russe) et où en tout point les poids restent rigoureusement homogènes.

Cas d'un corps composé

Si l'on a affaire à un mélange de corps de sections efficaces Σ_{Si} et de concentrations C_i on a :

$$\overline{\Sigma_T} = \sum_i c_i \Sigma_{Ti}$$

Il suffit de calculer une section efficace élastique moyenne $\overline{\Sigma}_S$ en considérant une perte moyenne de poids par choc qui est :

$$\frac{\overline{\Sigma}_S}{\overline{\Sigma}_T} = \sum_i c_i \frac{\Sigma_{Si}}{\Sigma_{Ti}}$$

Ce qui revient implicitement à donner à chaque élément une probabilité modifiée d'être choisi égale à la probabilité naturelle $\times \frac{\text{perte de poids de } i}{\text{perte de poids moyenne}}$ et ensuite un poids modifié valant $p_o \times \frac{\overline{\Sigma}_S}{\overline{\Sigma}_T}$.

Lorsqu'on a calculé $\overline{\Sigma}_S$, il est inutile ensuite de choisir l'élément choqué.

(Tout ceci supposait évidemment toutes les lois isotropes).

On opère de la même façon s'il y a plusieurs interactions possibles (toutes isotropes).

III.2 - Cas des chocs anisotropes

Le cosinus de l'angle de déviation dans le système du laboratoire (μ) a alors une probabilité de répartition quelconque, donnée sous la forme :

$$\text{avec } \int_{-1}^{+1} p(\mu) d\mu = 1$$

ceci est l'anisotropie naturelle.

L'anisotropie artificielle définie comme précédemment devient alors :

Probabilité pour que μ soit compris entre μ et $\mu + d\mu$:

$$Pb^*(\mu) = \frac{p(\mu) d\mu}{\sqrt{\Sigma_T^n - 2 \Sigma_T k \gamma \mu - k^2 (1 - \mu^2 - \gamma^2)}}$$

Pour une valeur donnée de μ les choix de γ' et de $\mathcal{L}$ restent les mêmes que dans le cas isotrope de seul tirage transformé est celui de μ .

On peut envisager 2 solutions possibles pour ce problème.

1) Développement en harmoniques sphériques

Supposons que $p(\mu)$ est développé en polynômes de Legendre :

$$p(\mu) = \sum_i f_i P_i(\mu)$$

$$\text{en posant } \text{sh} \psi = \frac{\mu - \frac{\sum_T \Upsilon}{k}}{\sqrt{\frac{\sum_T^2}{k^2} - 1} \sqrt{1 - \Upsilon^2}}$$

On obtient :

$$\int_{-1}^{\mu} P^*(\mu) d\mu = \sum_i f_i \int_{\psi_1}^{\psi_2} P_i(\text{sh} \psi) d\psi$$

ψ_1 et ψ_2 sont des fonctions de i , R et Υ que l'on peut calculer.

Ceci se met sous la forme :

$$P^*(\mu) = \sum_i f_i P_i(\psi)$$

les $P_i(\psi)$ étant des polynômes en $\text{sh} \psi$ ou $\text{ch} \psi$ calculables jusqu'à un ordre n quelconque.

Le tirage de μ dans ce cas revient donc à un tirage de ψ , dont la répartition de probabilité est donnée sous forme d'une somme de polynômes.

On pourrait alors envisager une méthode de rejet.

Ceci est une solution mathématique entièrement rigoureuse. L'inconvénient est que les formules deviennent rapidement très compliquées si l'on a besoin d'un développement d'ordre élevé.

2) Discrétisation et présentation matricielle

On peut faire un découpage de Υ et de μ , et calculer simplement les expressions discrètes :

$$P_{\Upsilon_i}^*(\mu_i) = A \sum_{\mu_{i'}=-1}^{\mu_i} \frac{P(\mu_{i'}) \Delta \mu_{i'}}{\sqrt{\sum_T^2 - 2 \sum_T \Upsilon_i \mu_{i'} - k^2 (1 - \mu_{i'}^2 - \Upsilon_i^2)}}$$

A étant un facteur de normalisation.

Le tirage de μ est alors extrêmement simple : connaissant Υ_i , on tire un nombre au hasard ξ entre 0 et 1 si $P_{ii}^* < \xi < P_{i(i+1)}^*$ on écrit directement $\mu = \mu_i$.

L'inconvénient est dû à la discrétisation, c'est-à-dire que d'une part on risque d'introduire une erreur systématique, d'autre part il faut garder la matrice P_{ii}^* en mémoire ce qui deviendra un problème surtout dans le cas polycinétique, quand l'anisotropie dépend de l'énergie.

Normalisation - Calcul de k

Dans le cas isotrope l'expression $N = \iiint_{\mu, \gamma', \ell} P^* d\ell d\gamma' d\mu$ était indépendante de γ .
Il suffisait donc d'écrire $N = 1$ pour obtenir la valeur correcte de k.

Dans le cas anisotrope on va trouver un résultat dépendant de γ :

$$N(\gamma)$$

Ceci conduirait à donner à une direction γ un poids correspondant à $N(\gamma)$.

Mais si l'on veut conserver des poids rigoureusement constants, on peut alors pondérer la probabilité de chaque direction γ' par le facteur $N(\gamma')$, ce qui permet alors de n'avoir pas de correction de poids.

Ceci conduit à l'équation suivante :

$$N(\gamma) = \int_{\mu} \int_{\gamma'} \int_{\ell} P^* \cdot N(\gamma') d\gamma' d\ell d\mu$$

et pour obtenir k il suffit de faire $\int N(\gamma) p(\gamma) d\gamma = 1$

$$\text{soit : } \iiint_{\gamma, \mu, \gamma', \ell} P_{\gamma}^*(\mu, \gamma', \ell) \cdot N(\gamma') d\gamma' d\ell d\mu d\gamma = 1$$

On voit que cette équation peut être résolue numériquement par itération en calculant d'abord les $N(\gamma)$ en prenant $N(\gamma') = \text{cste} = 1$, puis en prenant dans le calcul suivant les résultats du calcul précédent.

On obtient alors une valeur de k qui est une section de déplacement dans le cas où les chocs sont anisotropes analogue au coefficient de Placzek pour le cas isotrope. (Ces sections de déplacement ont été calculées analytiquement et numériquement par J.P. Millot Réf. [6]).

Conclusion

Cette méthode appliquée à un calcul de Monte Carlo doit présenter les avantages suivants :

- 1 - Variance très réduite puisqu'en un point donné l'encaissement a une valeur rigoureusement constante.
- 2 - Accélération du calcul, puisque chaque tirage n'est fait qu'en fonction de son intérêt pour la suite du calcul.

On constate en effet que l'anisotropie artificielle des chocs donne une proportion de chocs vers l'avant ($\gamma' = 1$) beaucoup plus grande que l'anisotropie naturelle, ceci quelle que soit la direction γ d'arrivée.

Et on constate aussi que la distance parcourue est beaucoup plus grande lorsque γ est voisin de 1.

Ces 2 phénomènes combinés permettront d'obtenir beaucoup plus vite le flux de neutrons à une distance Z de l'origine.

III.3 - Traitement du ralentissement dans un milieu lourd

Le problème a une solution presque rigoureuse dans le cas d'un milieu lourd, où les sections efficaces sont indépendantes de l'énergie.

1 - Cas d'un milieu sans absorption où les seules interactions sont des chocs élastiques isotropes.

Utilisons comme fonction d'importance l'expression :

$$A(E, x) = A(E_0, x_0) e^{+k(x-x_0)} \left(\frac{E_0}{E}\right)^{-\alpha}$$

Les neutrons auront ainsi un poids dépendant de leur énergie.

Comme nous allons le montrer les paramètres α et k sont liés de façon biunivoque, et le coefficient α peut être choisi de façon à favoriser les neutrons d'une énergie donnée, en fonction du résultat pratique que l'on cherche.

En un point Z le poids devient alors :

$$p = p_0 \cdot e^{-kZ} \cdot e^{\alpha \mu}$$

p_0 étant le poids à l'origine des coordonnées et des léthargies

Pour chaque choc élastique la perte d'énergie est donnée par la formule :

$$\frac{E}{E'} = \left[\frac{\mu + \sqrt{A^2 + \mu^2 - 1}}{1 + A} \right]^2$$

avec $A = \frac{M}{m}$ (rapport des masses) et μ déviation dans le système du laboratoire.

Le noyau K^* contiendra un terme supplémentaire :

$$\frac{A(E')}{A(E)} = \left(\frac{E}{E'}\right)^{\alpha}$$

Or $\left(\frac{E}{E'}\right)$ n'est fonction que de l'angle de déviation μ , donc il est de même pour le rapport $\frac{A(E')}{A(E)} = f(\mu)$.

On voit donc que ceci introduit une anisotropie artificielle, indépendante de l'énergie, qui est :

$$f(\mu) = \left(\frac{1+A}{\mu + \sqrt{A^2 + \mu^2 - 1}} \right)^{-2\alpha}$$

On est alors ramené au cas précédent, c'est-à-dire cas monocinétique anisotrope.

Normalisation - Calcul de k.

Nous allons utiliser une approximation du 1er ordre en $1/A$ et nous allons constater que dans ce cas la normalisation ne dépend pas de la direction γ avant choc (comme dans le cas monocinétique isotrope).

$$N(\gamma) = \int_{\mu} \int_{\gamma'} \int_{\ell} p^* d\mu d\gamma' d\ell = 1 \text{ indépendamment de } \gamma \text{ pour le 1er ordre en } 1/A$$

Cette équation va nous donner une relation entre k et α , l'une de ces quantités étant maintenant arbitraire.

Nous verrons ensuite comment déterminer α .

Comme précédemment on a :

$$N(\gamma) = \Sigma_T \int_{-1}^{+1} \frac{p(\mu) d\mu}{\sqrt{\Sigma_T^2 - 2 \Sigma_T d\gamma \mu - k^2 (1 - \mu^2 - \gamma^2)}} \text{ puisque } \Sigma_s = \Sigma_T$$

L'équation devient :

$$N(\gamma) = \Sigma_T \int_{-1}^{+1} \frac{(\mu + \sqrt{A^2 + \mu^2 - 1})^{2\alpha}}{(1+A)^{2\alpha} \Sigma_T^2 - \Sigma_T k \gamma \mu - k^2 (1 - \mu^2 - \gamma^2)} d\mu$$

Comme nous avons supposé le milieu lourd on peut développer l'expression en $\frac{1}{A}$.

En se limitant au 1er ordre et après simplification on obtient :

$$N(\gamma) = \frac{\Sigma_T (1 - \frac{2\alpha}{A})}{2k} \text{Log} \left(\frac{\Sigma_T + k}{\Sigma_T - k} \right) = 1$$

Ce qui nous redonne l'expression de Placzek avec une section d'absorption fictive de la forme $\Sigma_T \cdot \frac{2\alpha}{A}$.

Il n'y a donc plus une solution unique mais une famille de solutions définies par les couples (α, k) .

Remarque

Lorsque la masse atomique n'est pas très grande l'équation n'est qu'approchée car

les termes en $1/A^2$ ne sont plus négligeables.

On peut alors songer à annuler le terme de 2ème ordre ce qui donnera une 2ème équation en α et k . On constatera ainsi qu'il existe un couple (α, k) particulier qui donne une solution exacte au 2ème ordre. C'est pour ce couple que le nombre de neutrons restera le plus voisin d'une constante.

III.4 - Géométrie sphérique - cas monocinétique

Nous allons étudier ici soit le cas d'une source ponctuelle soit celui d'un centre d'intérêt.

Les solutions de l'équation sans second membre sont de la forme :

$$\frac{A}{r} e^{-kr} + \frac{B}{r} e^{kr}$$

r étant la distance du neutron à la source et k un scalaire.

Cherchons donc une fonction d'importance de la forme :

$$A = A_0 \frac{e^{kr}}{r}$$

Calculons le noyau modifié K^* dans le cas des chocs isotropes dans le système du laboratoire.

$$K^*(\gamma, r \rightarrow \gamma', r') = K(\gamma, r \rightarrow \gamma', r') \cdot \frac{r}{r'} \cdot \frac{e^{kr'}}{e^{kr}}$$

Pour une distance donnée l entre les 2 chocs :

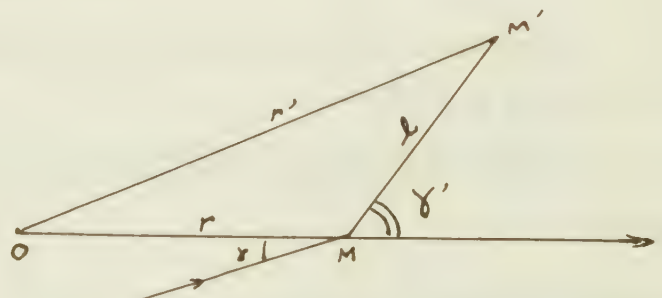
$$\int_{\gamma', l} K^* = \iint_{l, \gamma'} \frac{r e^{-kr}}{r' e^{-kr'}} \cdot \frac{\Sigma_s}{\Sigma_T} \cdot \Sigma_T e^{-\Sigma_T l} p(\gamma') d\gamma' d\gamma$$

$$p(\gamma') = 1/2$$

Or on a

$$r'^2 = r^2 + l^2 + 2rl\gamma'$$

soit $d\gamma' = \frac{r' dr'}{rl}$



d'où

$$\begin{aligned}
 \int k^* &= \frac{\Sigma s}{2} \int_{\ell} \int_{r'} e^{-kr'} \cdot e^{kr'} \cdot \frac{e^{-\Sigma_T \ell}}{\ell} d\ell dr' \\
 &= \frac{\Sigma s}{2} \int_0^{\infty} \frac{e^{-\Sigma_T \ell}}{\ell} d\ell \int_{|r-\ell|}^{r+\ell} e^{kr'} dr' \\
 &= \frac{\Sigma s}{2k} \int_0^{\infty} \frac{e^{(k-\Sigma_T)\ell} - e^{(k-\Sigma_T)\ell}}{\ell} d\ell \\
 &= \frac{\Sigma s}{2k} \text{Log} \left| \frac{\Sigma_T + k}{\Sigma_T - k} \right| \\
 &= 1
 \end{aligned}$$

On retrouve donc pour k la valeur du coefficient de Placzek.

Le calcul est donc analogue au calcul en géométrie plane.

Par contre la présence des radicaux dans le calcul de Υ' donne des expressions beaucoup plus compliquées.

Remarque

Ce résultat particulier pouvait être prévu. En effet dans le cas monocinétique et isotrope, l'équation adjointe homogène peut se mettre sous la forme de l'équation de la diffusion :

$$\Delta A - \frac{A}{L^2} = 0$$

dont la solution générale est :

en géométrie plane $A(z) = C_1 e^{\frac{z}{L}} + C_2 e^{-\frac{z}{L}}$

en géométrie sphérique $A(r) = \frac{C'_1}{r} e^{r/L} + C'_2 e^{-r/L}$

C_1, C_2, C'_1, C'_2 étant des constantes.

Dans le cas de chocs anisotropes le calcul de k est le même qu'en géométrie plane.

Et on peut envisager aussi un découpage discret en μ et une probabilité modifiée de la forme :

$$p(\mu) = \text{anisotropie naturelle} \times \text{anisotropie artificielle}$$

(On peut dire qu'en chaque point le problème est le même qu'en géométrie plane, la direction du vecteur k étant alors le rayon vecteur).

Remarque

Dans la réalisation pratique du cas sphérique les probabilités biaisées seront calculées comme en géométrie plane, car les formules rigoureuses font intervenir le rayon r et ne pourraient pas être prétabulées. Le biaisage ne sera donc pas idéal mais seulement approché, d'autant plus correctement que le rayon sera plus grand. Pour un rayon r donné les poids en fonction de la distance ne seront pas rigoureusement égaux à re^{-kr} mais seulement en moyenne, mais d'après ce que nous venons de démontrer on aura toujours statistiquement un neutron sortant pour un neutron source, et l'expérience a montré que la variance supplémentaire due à la géométrie sphérique est négligeable dans les problèmes concrets.

III.5 - Réalisation - Aspect des résultats

Un programme a été écrit afin d'utiliser ces principes théoriques et de vérifier les performances de la méthode. On l'a appliqué au cas d'une source plane, monocinétique (un spectre quelconque s'en déduisant par superposition), dans un milieu homogène de section efficace constante.

(La description de tous les programmes réalisés est faite en annexe I). Dans une phase préliminaire, après s'être fixé k arbitrairement on calcule α et les matrices de probabilités biaisées qui sont mises en mémoire. On traite ensuite les histoires neutron par neutron, de la source à sa sortie du milieu.

Au cours de son histoire un neutron décrit une certaine courbe dans l'espace des phases, cette courbe part du point $(z = 0, E = E_0)$ (coordonnées de la source), et aboutit à un point (z, E) tel qu'on ait soit $z = L$ (limite géométrique) soit $E = E_s$ (seuil en énergie).

Pour un couple α, k donné on peut définir une histoire moyenne, chaque état étant l'espérance mathématique de z et de L à partir de l'état précédent. Or la distance moyenne parcourue entre 2 chocs et la perte moyenne d'énergie ($\text{Log } \frac{E'}{E}$) sont indépendantes de z et de E , l'histoire moyenne est une droite dans le plan (distance, léthargie), partant de $(0, E_0)$ et aboutissant à (z_1, E_1) que l'on peut calculer.

Les chocs se situeront donc dans un domaine entourant cette histoire moyenne, et un couple (α, k) donné optimise alors ce domaine, puisque les chocs y sont plus nombreux. Pour k et α élevés l'anisotropie artificielle introduite est grande, la probabilité de suivre l'histoire moyenne est élevée, et cette histoire moyenne se situe à haute énergie. K grand optimisera donc un domaine étroit de l'espace des phases et les hautes énergies à grande

distance. Si K est plus faible la zone optimisée s'élargit et descend en énergie. On voit donc qu'il est possible de choisir k en fonction de la réponse cherchée, il suffit de placer la zone optimisée en conséquence (Pl. (2)).

Si l'on cherche une réponse dans un domaine plus étendu qu'une zone optimisée, on pourra alors superposer plusieurs systèmes de pondération, comme nous le verrons en détail plus loin.

Etude de la variance

Afin de calculer l'écart type σ en un point de l'espace des phases on a effectué un très grand nombre de calculs pour pouvoir déterminer :

- la taille à donner à un échantillon (nombre de neutrons traités par calcul)
- le nombre d'échantillons nécessaires pour que l'écart type apparent soit aussi proche que possible de l'écart type réel.

a - lorsque le nombre de neutrons par échantillon est faible on constate que la répartition des résultats n'est pas symétrique par rapport à la moyenne, les calculs donnant un résultat faible étant plus nombreux. Pour pouvoir utiliser l'écart type comme intervalle d'incertitude pour la position de la moyenne il faut que la répartition soit voisine d'une courbe de Gauss, et c'est ce qu'on obtient avec un échantillon suffisamment grand ($100 n^\circ$ dans notre cas).

b - lorsqu'on calcule l'écart type apparent σ_n sur un nombre n d'échantillons, et que l'on fait varier n de 0 à ∞ , on constate que σ_n commence par prendre des valeurs faibles, puis après quelques oscillations tend comme valeur limite qui reste l'écart type réel σ_∞ . On a donc pris un nombre N d'échantillons suffisant pour que σ_N devienne indépendant de N .

Ces conditions étant réalisées on a donc calculé $\sigma(x)$ en divers points de l'espace des phases, ainsi que $N_c(x)$ nombre moyen d'encaissements ayant contribué au résultat au point x . Et comme on pouvait le prévoir le produit $\sigma(x) \times N_c(x)$ reste très voisin de 1 quelque soit x . (Pl. (3) et (4)).

On obtient alors le résultat très important suivant : avec un seul calcul il est possible de donner à priori la valeur de $\sigma(x)$ en tout point x où le nombre d'encaissements est suffisant. On peut donc faire l'économie d'un calcul de variance. De plus les histoires ne s'arrêtant pas avant la sortie du milieu, $N(x)$ est pratiquement constant dans toute la zone optimisée, donc $\sigma(x)$ aussi.

On peut en déduire une méthode pour obtenir une réponse étendue avec une précision constante : on se donne plusieurs valeurs de k , de façon à ce que les diverses zones

optimisées par ces valeurs recouvrent tout le domaine qui nous intéresse. On effectue les calculs préliminaires avec les différents k , et les histoires de neutrons utiliseront d'abord le premier système de pondération jusqu'à ce que le nombre d'encaissements soit suffisant dans la région optimisée, on change alors de système et ainsi de suite, ce qui est une stratification de l'échantillonnage, la taille de chaque échantillon étant fixée par le calcul lui-même. En chaque point on cumule alors les résultats des divers systèmes en les pondérant par $\sqrt{N_i}$, N_i étant le nombre d'encaissements relatifs à chaque système. L'expérience a montré qu'avec au maximum 4 valeurs de k on décrit pratiquement tout le domaine de l'espace des phases relatif aux problèmes courants avec une précision constante fixée a priori.

III.6 - Gain de la méthode

Afin de chiffrer le gain de temps que représente l'utilisation de ces biaisages on a écrit un programme utilisant seulement le biaisage du tirage de la distance (transformation exponentielle) [11] [12] [17]. Les tirages angulaires étaient effectués selon les lois naturelles, puis les poids étaient corrigés conformément aux importances définies ci-dessus. On l'a comparé successivement à un programme utilisant les biaisages d'un choc sans tenir compte de la direction d'entrée, (matrice à 2 dimensions) puis en tenant compte de cette direction (matrices à 3 dimensions).

On a donc cherché le gain éventuel obtenu en tirant à priori les histoires intéressantes, par rapport à une élimination à posteriori, compte tenu du temps nécessaire aux calculs préliminaires.

L'exemple choisi est celui d'un corps de section efficace (constante par hypothèse) voisine de celle du graphite à basse énergie, et d'épaisseur 1 mètre.

On a calculé à diverses distances de la source le produit $\sigma_x t$ (t = temps de calcul) avec les 3 programmes (1, 2 ou 3 biaisages). A la sortie du milieu on a constaté que :

$$\frac{\sigma_x t(1)}{\sigma_x t(2)} \sim 2 \quad \frac{\sigma_t(2)}{\sigma_t(3)} \sim 3$$

On gagne donc en tout un facteur 6 sur le temps de calcul pour une même précision, ce qui est considérable car les temps de calcul des programmes de Monte Carlo sont toujours grands, et qu'on peut donc effectuer en 10 minutes ce qui demandait une heure et envisager des problèmes impossibles autrement. On a donc cherché à adapter la méthode aux problèmes concrets, car même si le gain est moins grand il restera important et les biaisages justifiés.

IV - CAS REEL. MILIEU HOMOGENE DE SECTION EFFICACE QUELCONQUE

IV.1 - Section efficace totale variable

Dans les cas concrets la section efficace est une fonction de l'énergie, cette fonction pouvant être très complexe ; elle est donnée point par point.

Théoriquement il est possible d'utiliser toujours rigoureusement la même méthode. En effet si l'on suppose que l'importance en fonction de la distance reste en e^{+kz} , on peut en déduire une importance en fonction de l'énergie point par point comme la section efficace : on part de l'énergie E_m minimale du problème (par exemple l'énergie thermique) pour laquelle on se fixe $A(E_m)$, puis en remontant en énergie on résout pour chaque point l'équation :

$$\int_{x'} K(x \rightarrow x') \frac{A(E')}{A(E)} = 1$$

où la seule inconnue est $A(E)$ puisque E' est obligatoirement inférieure à E .

Mais on voit que les matrices de biaisages dépendent alors de l'énergie. Or si l'on considère que les sections efficaces peuvent être données avec plus de 1000 points on voit facilement que l'encombrement est prohibitif.

On a donc cherché un schéma simplifié permettant les biaisages, ensuite à chaque choc on corrigera le poids du neutron à posteriori en fonction des données exactes. Evidemment plus le schéma se rapprochera de la réalité, plus les corrections seront faibles et moins la variance s'en ressentira, on a donc cherché un compromis entre la complexité du problème et la dimension du calculateur.

On prend une section efficace simplifiée en remplaçant la courbe réelle par un certain nombre de paliers de section efficace constante (moyenne des valeurs exactes dans l'intervalle d'énergie correspondant). Si les paliers sont suffisamment larges pour que l'énergie après choc n'entraîne que rarement un changement de palier, pour chacun de ces paliers on peut définir comme précédemment une valeur α_i correspondant à une importance en $(\frac{E}{E_0})^{\alpha_i}$, pour k fixé une fois pour toute. La courbe $A(E)$ en fonction de $\text{Log}(E)$ devient une ligne brisée. Les biaisages sont calculés avec la section efficace du palier Σ_M et lors du calcul on corrigera le poids du neutron par le rapport $\frac{\Sigma_T}{\Sigma_T - k \Upsilon'} \times \frac{\Sigma_M - k \Upsilon'}{\Sigma_M}$, si Σ_T est la

section exacte, en général ce facteur est peu différent de 1 et les biaisages gardent leurs avantages.

Remarque

Dans le cas des corps à section efficace variable on a songé à utiliser un schéma un peu différent avec des valeurs k_i différentes sur chacun des paliers, ceci dans le but de traduire les déformations de spectre. Cette méthode a donné des résultats décevants car elle implique des corrections de poids importantes lors des changements de palier et une variance augmentant avec la distance. En effet les déformations de spectre se situent au voisinage immédiat des frontières, et dans un milieu infini la meilleure approximation de la solution du problème adjoint reste $A(E) e^{kz}$.

IV.2 - Chocs inélastiques

Lors d'un choc inélastique l'énergie et la direction après choc sont indépendantes. L'énergie après choc est donnée par une formule : $p_E(E') dE' g(E, E') dE$, $p_E(E')$ étant la densité de probabilité d'obtenir une énergie E' après choc. La direction est isotrope.

Le noyau modifié s'écrit alors :

$$K^* = K_1(\Omega \rightarrow \Omega') \cdot K_2(E \rightarrow E') \cdot \frac{A(E')}{A(E)}$$

$$\text{et} \quad \int_{\Omega'} K^* = \int_{\Omega'} K_1(\Omega \rightarrow \Omega') \cdot \int K_2(E \rightarrow E') \cdot \frac{A(E')}{A(E)} dE' = 1$$

On voit qu'il suffit d'utiliser une formule biaisée de spectre après choc :

$$g^*(E, E') = \frac{g(E, E') \frac{A(E')}{A(E)}}{\int g(E, E') \frac{A(E')}{A(E)} dE'}$$

Si l'on a simultanément des chocs élastiques avec une probabilité $\frac{\Sigma_{el}}{\Sigma_T}$ et des chocs inélastiques avec une probabilité $\frac{\Sigma_{inel}}{\Sigma_T}$ on obtient :

$$K^* = \frac{\Sigma_{el}}{\Sigma_T} \int K_{el}(x \rightarrow x') \frac{A(x')}{A(x)} dx' + \frac{\Sigma_{inel}}{\Sigma_T} \int K_{inel}(x \rightarrow x') \frac{A(x')}{A(x)} dx$$

Ce qui conduit à utiliser des probabilités de choc élastique et inélastique biaisées :

$$\frac{\Sigma_{el}^*}{\Sigma_T} = \frac{\Sigma_{el}}{\Sigma_T} \int K_{el}^* \quad \text{et} \quad \frac{\Sigma_{inel}^*}{\Sigma_T} = \frac{\Sigma_{inel}}{\Sigma_T} \int K_{inel}^*$$

Comme la perte d'énergie par choc inélastique est très importante on ne peut plus garder des paliers indépendants les uns des autres, on commence donc par le palier d'énergie la plus faible, puis on calcule les α_i successifs en résolvant l'équation $\int K_i^* = 1$ par itération.

De plus comme le choc inélastique est considéré comme isotrope, la direction après choc sera telle que :

$$\text{probabilité de } \gamma' = p^*(\gamma') = \frac{\sum T}{\sum T - k\gamma'} d\gamma'$$

$$\text{et comme } \int_{\gamma'} p^*(\gamma') = \frac{\sum T}{2k} (E') \text{ Log } \frac{\sum T(E') + k}{\sum T(E') - k} = T(E'), \text{ cette norme peut être}$$

introduite dans l'expression de $g^*(E, E')$, soit :

$$g^*(E, E') = \frac{g(E, E') \frac{A(E')}{A(E)} \cdot T(E')}{\int g(E, E') \frac{A(E')}{A(E)} \cdot T(E')}$$

ce qui évite la correction de poids $T(E')$ qu'on aurait dû effectuer afin de tirer la direction après choc.

IV.3 - Cas de l'hydrogène

C'est un cas difficile car lors d'un choc élastique sur un noyau d'hydrogène la perte d'énergie peut être très importante. En effet si E est l'énergie avant choc et E' après choc on a toujours $\frac{E'}{E} = \left(\frac{\mu + \sqrt{M^2 + \mu^2 - 1}}{M + 1} \right)^2$ M étant la masse atomique. La perte maximale d'énergie est donc $\left(\frac{M - 1}{M + 1} \right)^2$. Ce rapport est voisin de 1 pour les corps lourds, c'est pourquoi on calcule les biaisages dans l'hypothèse où l'énergie après choc n'entraîne pas un changement de palier. Mais dans le cas de $M = 1$ (hydrogène) chaque choc peut théoriquement donner même $E' = 0$.

On procèdera donc comme pour les chocs inélastiques en commençant par le palier de plus basse énergie, puis pour les paliers suivants on cherche pour chaque direction quelle est la perte d'énergie $\frac{E'}{E}(\mu)$ et quel est le palier correspondant à E' . C'est la section efficace Σ'_M de ce palier d'arrivée qui sera utilisée dans le biaisage, et lors du calcul la correction de poids sera $\frac{\sum T}{\sum T - k\gamma'} \times \frac{\Sigma'_M - k\gamma'}{\Sigma'_M}$. (Il faudra donc retrouver à chaque choc sur l'hydrogène quelle valeur Σ'_M avait été utilisée pour biaiser le tirage de la direction).

Remarque : Les calculs dans des milieux hydrogénés conduisent donc toujours à une variance plus importante que dans le cas des corps lourds. Afin d'améliorer un peu ce cas, et après le calcul de toutes les valeurs de α , on calcule pour chaque énergie du découpage fin quelle sera la correction de poids après un choc sur l'hydrogène, ceci moyenné sur toutes les directions. Cette correction moyenne servira alors à pondérer la probabilité de choisir l'hydrogène dans la composition, et compte tenu de ce raffinement la correction réelle sera donc 1 en moyenne.

IV.4 - Mélange de corps

Un mélange sera traité exactement comme dans le cas théorique des corps à section efficace constante, et conduit à des proportions biaisées :

$$C_i^* = \frac{C_i \int K_i^*}{\sum_i \int K_i^*}$$

On peut remarquer de plus qu'il est possible de se passer du choix de l'élément pour les chocs inélastiques, puisque ceux-ci ont tous même répartition angulaire. On définit alors une probabilité de choc inélastique par composition :

$$\Sigma_{\text{inél}}^* = \sum_i \Sigma_i^* \times C_i^*$$

et une répartition d'énergie après choc unique :

$$g^*(E, E') = \sum_i g_i^*(E, E') \cdot C_i^*$$

ce qui est une économie de temps, et surtout d'encombrement en mémoire.

On pourrait évidemment agir de même pour les chocs élastiques mais le nombre total de termes de biaisage ne changerait pas, donc c'est inutile.

Remarque

Afin d'abréger le temps de calcul de Monte Carlo proprement dit toutes les probabilités sont cumulées, c'est-à-dire que si P_i^* est la probabilité d'un événement i on met en mémoire les nombres P_1^* , $P_1^* + P_2^*$, $P_1^* + \dots + P_i^*$, il suffit ensuite de placer le nombre tiré entre 0 et 1 dans le tableau ci-dessus pour obtenir i . Pour la même raison on place d'abord les corps les plus importants de la composition, car ils sont tirés plus souvent et leur choix doit être le plus rapide.

IV.5 - Trous de section efficace

Un problème se pose lorsqu'une section efficace présente un minimum étroit et très accusé, il existe alors des énergies pour lesquelles Σ_T est plus petit que k ; dans un tel cas les calculs précédents ne sont plus applicables car le noyau K^* ne peut plus être normé.

On a d'abord utilisé une solution simple (nous verrons plus loin qu'il est possible de l'améliorer).

On fait d'abord l'hypothèse que les sections moyennes des paliers sont toujours telles que $\Sigma_M > k$. La direction est donc tirée avec les probabilités biaisées en Σ_M . Si la direction Υ' tirée est telle que $\Sigma_T - k \Upsilon' < 0$ on fait alors intervenir la distance L qui reste à parcourir dans la direction Υ' pour atteindre la limite du milieu.

La probabilité qu'a le neutron de sortir est :

$$p_1 = \left| \Sigma_T^* \right| e^{-\Sigma_T^* L} \quad \text{avec} \quad \Sigma_T^* = \Sigma_T - k \Upsilon'$$

ceci avec un poids corrigé $\pi = \frac{\Sigma_M - k \Upsilon'}{\Sigma_M} \times \frac{\Sigma_T}{|\Sigma_T^*|}$

On peut également dire que le neutron a une probabilité 1 de sortir avec un poids $p_1 \times \pi$, ce qui est statistiquement équivalent.

La probabilité pour qu'il reste dans le milieu est :

$$p_2 = 1 - \left| \Sigma_T^* \right| e^{-\Sigma_T^* L}$$

avec le poids π

Si $p_2 \times \pi$ est < 1 on peut lui donner une probabilité $p_2 \times \pi$ de subsister avec le poids 1 (roulette russe), et si $p_2 \times \pi$ est > 1 (ce qui est le cas général)

On dépose $p_2 \times \pi$ neutrons entre le point de choc et la frontière de la façon suivante :

On tire $p_2 \pi$ nombres au hasard $A_1, A_2, \dots$ les neutrons seront situés aux distances successives $l_1, l_2 \dots$ définis par :

$$\int_0^{l_1} \frac{\Sigma_M - k \Upsilon'}{\Sigma_M} \cdot \Sigma_T e^{-\Sigma_T^* l_1} = A_1$$

$$\int_0^{l_2} \frac{\Sigma_M - k \Upsilon'}{\Sigma_M} \Sigma_T e^{-\Sigma_T^* l_2} = 1 + A_2 \text{ etc } \dots$$

Ce splitting "réparti en distance" donne une variance plus faible que si l'on avait tiré les p_2 neutrons tout à fait au hasard.

IV.6 - Les sources

Les sources peuvent être étendues avec une distribution quelconque en énergie, en distance et en direction :

$$S(z, E, \Upsilon')$$

Elles seront également biaisées :

$$S^*(z, E, \Upsilon') = S(z, E, \Upsilon') \times A(z) \times A(E) \times A(\Upsilon')$$

On tirera les coordonnées d'origine des neutrons avec la densité de probabilité :

$$P^*(z, E, \Upsilon') dz dE d\Upsilon' = \frac{S^*(z, E, \Upsilon') dz dE d\Upsilon'}{\int S^*}$$

Dans le cas de la géométrie sphérique le biaisage des sources est effectué avec la fonction d'importance idéale $A(r) = \frac{e^{kr}}{r}$, mais comme nous l'avons expliqué précédemment en cours de calcul on utilise ensuite un biaisage approché où $A(r) = A(r_0) e^{kz}$ z étant compté sur le rayon vecteur au point de choc.

IV.7 - Réalisation. Résultats. Variance

Le programme ainsi réalisé s'appelle Poker 1. C'est donc un programme pouvant calculer en géométrie plane ou sphérique l'atténuation de neutrons issus d'une source quelconque dans un milieu homogène d'épaisseur quelconque, et il est particulièrement adapté au cas des grandes pénétrations.

(Pour quelques détails techniques de réalisation se reporter à l'annexe II) comme dans le cas du programme à sections efficaces constantes on a d'abord vérifié que la variance restait du même ordre que ce que l'on attendait. Pour cela on a défini un cas test simple avec une section efficace présentant toutes les anomalies possibles des problèmes concrets (anisotropie, chocs inélastiques, trou de section efficace) afin d'effectuer un très grand nombre de calculs courts.

Les résultats ont sensiblement le même aspect que dans le cas précédent : il existe pour chaque valeur de k une zone optimisée située aux environs de l'histoire moyenne. Cependant plus la complexité du problème augmente moins ce maximum de précision est accusé.

Comme précédemment on a d'abord cherché quelle taille donner à l'échantillon pour que la répartition des résultats soit symétrique par rapport à la moyenne. Puis avec cet échantillon minimum (500 neutrons dans notre cas) on a cherché la valeur asymptotique de σ et l'on a calculé le produit $\sigma \times N_c$ de l'écart type par le nombre d'encaissements. Cette fois ce produit ne reste plus rigoureusement égal à 1, mais atteint 2 ou 3 au bout d'une distance égale à une centaine de libres parcours moyens (le libre parcours est la distance $\frac{1}{\sum \tau}$ moyenne parcourue entre 2 chocs). Cette augmentation de la variance est surtout due au trou de section efficace qui est le plus mal traité. Sans ce trou $\sigma \times N_c$ ne dépasse pas 1,5. Malgré tout la précision obtenue est très intéressante.

On peut encore choisir la valeur de k en fonction du résultat souhaité, et superposer plusieurs pondérations éventuellement. En particulier si l'on cherche une réponse étendue de la forme $I(x)$, on commence le calcul avec une valeur de k et l'on attend que le nombre d'encaissements dans la zone Δx optimisée soit proportionnel à $I^2(x)$, puis on change k et ainsi de suite. La précision sur la réponse totale $I = \int I(x) \psi(x) dx$ sera alors constante quel que soit le point x d'encaissement.

IV.8 - Exemples concrets. Comparaisons

Ce programme a été appliqué au cas de l'eau, du fer et du sodium en particulier [25].

Dans le cas d'un massif de fer d'épaisseur 1 mètre, avec comme source des neutrons de fission, on a décrit avec une précision constante ($\sigma = 10\%$) tout le spectre à la sortie du massif, de 18 MeV à 0,025 eV, ceci avec un temps de calcul de 10 minutes de machine IBM 360/50. (Pl. (4)). Avec un programme de Monte Carlo sans biaisages σ atteignait 1 au bout de 20 cm pour un même temps de calcul [7] [17].

Dans le cas du sodium on a traité l'atténuation dans une épaisseur de 7 mètres. Le sodium ayant une section efficace assez régulière on a encore obtenu tout le spectre à la sortie avec le même écart type de 10% en 10 minutes de 360/50 (Pl. (5)). Ce calcul a été effectué d'autre part avec une méthode d'intégration numérique (code Niobé. Méthode SN, [16]). Pour obtenir un même résultat il a fallu une heure de calcul et ceci sans tenir compte du fait que le code Monte Carlo fournit un ordre de grandeur de la précision, ce qui n'est pas le cas de la méthode numérique.

Les performances du code Poker 1 sont donc remarquables ; malheureusement il ne s'applique qu'aux milieux homogènes, c'est pourquoi on l'a alors adapté en cas des changements de milieu.

V - CAS DE PLUSIEURS MILIEUX DE COMPOSITION DIFFERENTE

V.1 - Traitement direct

Soit une frontière séparant 2 milieux i et j ; dans chacun on peut définir indépendamment une valeur de k (k_i et k_j) et l'importance correspondante en fonction de l'énergie $A_i(E)$ et $A_j(E)$.

Lorsqu'un neutron traverse la frontière avec une direction γ il faut lui faire subir une correction de poids :

$$N_{ij} = \frac{\sum T_i - k_i \gamma}{\sum T_i} \times \frac{\sum T_j}{\sum T_i - k_j \gamma} \times \frac{A_i(E)}{A_j(E)}$$

Comme dans le cas des trous de section efficace on préférera déposer N_{ij} neutrons dans le milieu j aux distances $l_1, l_2 \dots$ telles que :

$$N_{ij} \int_0^{l_1} \sum T_i^* e^{-\sum T_i^* l} dl = A_1$$

$$N_{ij} \int_0^{l_2} \sum T_i^* e^{-\sum T_i^* l} dl = 1 + A_2$$

etc...

Pour conserver le principe de la méthode qui est de n'arrêter une histoire que si l'on sort des limites du problème il faut que N_{ij} vaille 1 en moyenne. Si $n(E)$ est le nombre de neutrons arrivant à la frontière avec une énergie $(E, E + dE)$ il faut que :

$$\int_E N_{ij}(E) n(E) dE = 1$$

Si $A_i(E)$ est fixé il faut choisir k_i et $A_j(E)$ vérifiant cette équation. Si l'on veut déterminer les pondérations à priori il faut faire une hypothèse sur $n(E)$. On a adopté la solution simple d'un spectre constant en léthargie, soit $n(E) = \frac{dE}{E}$.

On choisit donc arbitrairement la valeur de k_1 , ensuite toutes les autres s'en déduisent. Les biaisages sont préparés en début de calcul, ensuite le Monte Carlo se déroule comme précédemment neutron par neutron.

C'est la version Poker 2 du programme [27] , qui donne de bons résultats dans les problèmes courants (3 ou 4 milieux) [30] . Cependant en étudiant la variance on constate que le produit $\sigma \times N_c$ subit une augmentation à chaque frontière, d'un facteur dépendant essentiellement des milieux traversés, car évidemment si ce sont des milieux de propriétés voisines la correction reste faible.

On a ainsi traité avec succès un lamellage de fer et de sodium, de fer et d'eau, de fer et de carbone par exemple [26] .

Deux sortes de problèmes restent difficiles : le cas de deux milieux très différents, pour lesquels le spectre en $1/E$ est très loin de la réalité, et le cas d'un très grand nombre de frontières.

V.2 - Remaniement sur une frontière

Si l'hypothèse du spectre en $1/E$ se révèle inapte, on peut alors effectuer le calcul en plusieurs étapes : on traite d'abord les milieux situés avant la frontière, et on utilise ensuite les valeurs du courant de neutrons sur la frontière comme source pour un calcul dans les milieux suivants.

On peut donc ainsi se servir du spectre exact pour calculer les biaisages au-delà de la frontière, et le nombre initial de neutrons est automatiquement conservé. Cette méthode allonge le temps de calcul mais s'est révélée indispensable dans certains cas (frontière uranium fer par exemple). C'est une façon d'utiliser les informations déjà fournies pour obtenir les suivantes.

Le code ainsi réalisé a été appliqué à un certain nombre de problèmes de protection concrets (château de transport Petrus, protection des réacteurs rapides Harmonie et Phénix, et d'un réacteur à eau légère). Les mêmes calculs ont été effectués avec deux codes d'intégration numérique par la méthode SN très élaborés (ANISN et NIOBE) [29] [33] [34] [35] .

On constate un excellent accord sur les résultats pour des temps de calcul du même ordre ou légèrement inférieurs pour le Monte Carlo, ce qui montre que la méthode de Monte Carlo biaisée devient compétitive des méthodes d'intégration numériques dans les cas où ces dernières sont utilisables. Et son extension beaucoup plus facile à des problèmes différents (tridimensionnel, adjoint) en fait un instrument précieux. (Pl. (7) (8) (9)).

V.3 - Biaisage tenant compte des milieux suivants

Nous avons cherché à résoudre là le problème très difficile d'un grand nombre de frontières, dans le cas particulier d'un lamellage non régulier de 20 lames de fer de l'eau.

En effet dans le traitement exposé précédemment lorsqu'un neutron traverse une frontière il subit une correction de poids de la forme :

$$\frac{\Sigma_{T_1} - k_1 \Upsilon'}{\Sigma_{T_1}} \times \frac{\Sigma_{T_2}}{\Sigma_{T_2} - k_2 \Upsilon'} \times \frac{p_1}{p_2}$$

Υ' étant sa direction, Σ_{T_1} et Σ_{T_2} les sections efficaces des milieux 1 et 2, et p_1 et p_2 les poids en fonction de l'énergie dans les milieux 1 et 2 ($p_1 = \frac{1}{A_1(E)}$, $p_2 = \frac{1}{A_2(E)}$).

Cette correction dépend de Υ' de 2 façons : par le terme $\frac{\Sigma_{T_1} - k_1 \Upsilon'}{\Sigma_{T_2} - k_2 \Upsilon'}$ et aussi par le fait que l'énergie après choc dépend de la direction choisie, et donc que Σ_{T_1} et Σ_{T_2} et p_1 et p_2 dépendent de Υ' . Donc pour certaines directions la correction peut être très importante, et très faible pour d'autres, ce qui se traduit parfois par un fractionnement en plusieurs descendants, et parfois par une roulette russe et disparition du neutron.

Dans le cas d'un trou de section efficace nous avons vu qu'après le tirage de la direction on peut être amené aussi à effectuer une correction de poids importante

$$\left(\frac{\Sigma_M}{\Sigma_M - k \Upsilon'} \times \frac{\Sigma_T - k \Upsilon'}{\Sigma_T} \right) \text{ dépendant également de la direction choisie.}$$

Lorsque le problème se pose un grand nombre de fois dans un même calcul il s'en suit une variance de plus en plus grande.

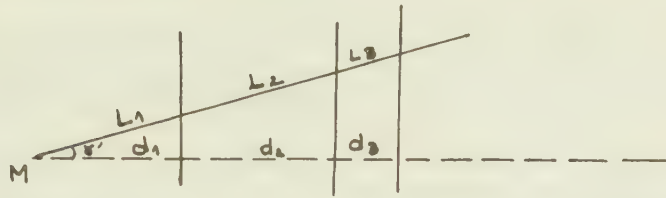
Lorsqu'un choc a lieu près d'une frontière ou d'un trou de Σ_T , on a donc cherché à biaiser le tirage de la direction après choc de façon à tenir compte des corrections de poids éventuelles ; ce biaisage dépendra donc de la position du neutron et de la géométrie du milieu.

Au lieu d'écrire que l'importance d'une direction $A(\Upsilon')$ vérifie l'équation adjointe homogène dans le milieu 1 infini, on écrira que cette équation est vérifiée dans un domaine comprenant le milieu 1 avec sa dimension exacte dans le sens de propagation puis le milieu 2 infini, et si la probabilité de sortir du milieu 2 est encore importante, c'est le milieu 3 qui sera considéré comme infini, et ainsi de suite...

On obtiendra donc de nouvelles probabilités biaisées $P^{*'}(\Upsilon')$ dont la norme n'est pas forcément 1, mais une valeur n qui sera beaucoup plus proche de 1 que la valeur maximale de la correction possible au cours d'une histoire. On tirera alors n neutrons dans n directions Υ' avec les probabilités $P^{*'}(\Upsilon')$, et ces neutrons ne subiront aucune correction de poids sur la ou les frontières prises en compte par le biaisage.

Plus précisément le schéma est le suivant :

Soit un neutron ayant subi un choc au point M à la distance d_1 de la frontière du milieu 1.



Pour une direction γ' éventuelle de sortie la distance à parcourir dans les milieux 1, 2, 3 est respectivement $L_1, L_2, L_3 \dots$ La probabilité qu'à le neutron de franchir la 1ère frontière avant le choc suivant est :

$$e^{-(\Sigma T_1 - k_1 \gamma') L_1}$$

Lorsque cette probabilité est inférieure à P_0 (fixée arbitrairement à 0.25) le choc est traité comme en milieu infini, sinon on adoptera le traitement spécial que nous allons décrire. (on remarque que la condition $e^{-(\Sigma T_1 - k_1 \gamma') L} < 0.25$ tient compte à la fois des frontières - L_1 faible - et des trous de section efficace - ΣT_1 faible -).

On cherche d'abord le nombre de frontières au-delà desquelles on peut encore trouver une fraction du neutron initial supérieure à 0.25, compte tenu des probabilités de traverser chaque milieu sans choc et des corrections de poids rencontrées chaque fois, soient les conditions successives, écrites pour le cas de $\gamma' = 1$ qui donne presque toujours les corrections maximales (ceci pour abréger un peu le calcul) :

$$e^{-(\Sigma T_1 - k_1) d_1} > 0.25$$

$$e^{-(\Sigma T_1 - k_1) d_1} \times \frac{p_1}{p_2} \times e^{-(\Sigma T_2 - k_2) d_2} > 0.25$$

D'où le nombre N de frontières à traiter si :

$$\prod_{i=1}^{N+1} e^{-(\Sigma T_i - k_i) d_i} \times \frac{p_i - 1}{p_i} \times e^{-(\Sigma T_1 - k_1) d_1} < 0.25$$

Ensuite pour chaque direction γ' la probabilité biaisée n'est plus $\frac{\Sigma T_1}{\Sigma T_1 - k_1 \gamma'}$

mais :

$$\begin{aligned}
 P^*(Y') = & \frac{\Sigma T_1}{\Sigma T_1 - k_1 Y'} \times \left[(1 - e^{(-\Sigma T_1 + k_1 Y') L_1}) + e^{(-\Sigma T_1 + k_1 Y') L_1} \times \frac{(p_1)}{(p_2)} \times (1 - e^{(-\Sigma T_2 + k_2 Y') L_2}) \right. \\
 & + \dots + e^{\sum_{i=1}^{N_i-1} (-\Sigma T_i + k_i Y') L_i} \times \frac{p(1)}{p(i+1)} \times (1 - e^{(-\Sigma T_{i+1} + k_{i+1} Y') L_{i+1}} \\
 & \left. + \frac{p(1)}{p(N_i)} \times e^{\sum_{i=1}^{N_i} (-\Sigma T_i + k_i Y') L_i} \right] \quad (1)
 \end{aligned}$$

Pour chaque valeur Y'_i du découpage en direction on calcule alors l'expression $\pi_i = \sum_j P^*(Y'_j)$. On tire un nombre A au hasard entre 0 et 1, lorsqu'on obtient $\pi_{i+1} < A < \pi_i$ un neutron prend la direction Y' telle que $\frac{Y' - Y'_{i-1}}{Y'_i - Y'_{i-1}} = \frac{A - \pi_{i-1}}{\pi_i - \pi_{i-1}}$

Puis on tire un 2ème nombre aléatoire A et quand $\pi_{i-1} < A < \pi_i$ le 2ème neutron prend la direction Y' telle que $\frac{Y' - Y'_{i-1}}{Y'_i - Y'_{i-1}} = \frac{A - \pi_{i-1}}{\pi_i - \pi_{i-1}}$. Les neutrons créés au cours d'un choc sont alors répartis dans des directions différentes, ce qui diminue la possibilité de corrélations.

(Afin d'alléger le calcul on peut faire plusieurs prétabulations des exponentielles apparaissant la formule (1) ; en effet les facteurs $e^{-(\Sigma T_i - k_i Y') L_i}$ sont indépendants de la position du choc dans le milieu 1).

Lorsque l'on a obtenu les n directions choisies Y' on tire alors la distance parcourue par chacun comme précédemment mais sans correction de poids sur les frontières. Ceci constitue le programme Poker 3.

V.4 - Application. Résultats

Le programme Poker 3 a été appliqué au cas d'un lamellage de fer et d'eau (Pl. (11)). Le même problème a été traité avec le programme Poker 2 pour comparer leurs performances respectives [31].

Pour un domaine donné de l'espace des phases l'écart type σ varie avec le nombre d'encaissements N selon l'expression $\sigma = \frac{a}{\sqrt{N}}$ car les scores sont tous à peu près égaux.

Si la variance d'un résultat était uniquement due à la variance sur le nombre de scores, on aurait $a = 1$ (cas du simple comptage). On a vu que dans un milieu homogène,

Poker 2 permet d'obtenir des valeurs de a restant très voisines de 1. Par contre a augmente avec le nombre de frontières et de trous de section efficace.

Afin de comparer Poker 2 et Poker 3 on a donc calculé l'expression $\sigma \sqrt{N}$ dans les lames successives, puis le rapport $\frac{\sigma \sqrt{N} \text{ (Poker 2)}}{\sigma \sqrt{N} \text{ (Poker 3)}}$ (Pl. (10)).

Après 19 frontières la valeur de $a = \sigma \sqrt{N}$ atteignait 16 avec Poker 2 et n'est plus que de l'ordre de 4 dans Poker 3, les seules causes d'augmentation de a étant alors les discontinuités de poids en fonction de l'énergie et les découpages angulaires discrets.

Avec un même temps de calcul les 2 derniers spectres n'étaient pas donnés par Poker 2 (écart type supérieur à 100%).

Le temps de calcul de Poker (3) est supérieur d'un facteur 1,4. On voit donc que pour les 5 premières lames le programme Poker 2 donnait d'aussi bons résultats.

Par contre au-delà le gain devient très important et atteint un facteur 4, ce qui justifie largement le temps de calcul un peu augmenté.

Conclusion

Dans la plupart des problèmes courants les résultats fournis par Poker 2 sont satisfaisants. Mais pour certains cas difficiles (nombreuses frontières séparant des milieux très différents) comme celui qui nous était proposé, on voit qu'il est possible d'améliorer le traitement de façon considérable, et d'obtenir des résultats que l'on n'atteignait pas.

VI - DETECTION D'HISTOIRES EXTRAORDINAIRES - EXEMPLE.

Dans tout ce qui précède, et même dans les calculs pour lesquels la variance est très faible, on peut tout de même se poser une question : n'existe-t-il pas une probabilité très faible d'obtenir une histoire très différente des autres ? En particulier dans les problèmes de protection que nous traitons, n'y a-t-il pas une probabilité non nulle d'obtenir une histoire conduisant à un poids anormalement élevé à la sortie du milieu ? Tant qu'une telle anomalie n'a pas été observée, il est impossible d'affirmer qu'elle n'existe pas : si l'on a par exemple une atténuation de 10^{-6} , obtenue en étudiant 10^4 histoires, et s'il existait avec une probabilité de 10^{-5} , un neutron qui n'aurait qu'une atténuation de 10^{-1} , on voit que ceci transformerait tout-à-fait le résultat.

Le seul moyen de s'en rendre compte serait de traiter 10^9 ou 10^8 histoires ; l'atténuation étant au plus de 1, on pourrait alors affirmer que le résultat est exact. Mais le temps de calcul est prohibitif. On peut alors raccourcir les histoires normales, et ne traiter que les éventuelles anomalies, dans ce cas les histoires normales seraient traitées si rapidement qu'on pourrait en suivre beaucoup plus.

Comme les anomalies se traduisent pour nous uniquement par un poids trop grand notre méthode est de placer un certain nombre de "barrières" sur le parcours des neutrons ; c'est-à-dire un certain nombre de cotes Z sur lesquelles on impose un facteur très grand au terme d'importance : si celle-ci était e^{kz} , après une barrière $A(z)$ devient $\frac{ekz}{100}$, et en moyenne seuls les neutrons ayant un poids de l'ordre de 100 franchiront la barrière.

Dans le cas particulier d'un lamellage fer-eau on avait constaté que sur les 2000 histoires traitées dans un calcul normal, il se trouvait 2 histoires très différentes des autres, dues à des neutrons de très haute énergie. On a donc appliqué la méthode des "barrières" et traité ainsi 30 000 histoires accélérées, ce qui a permis de préciser la proportion des histoires anormales (24 pour 30 000).

Dans notre exemple nous n'avons fait que préciser une anomalie observée, mais on peut aussi appliquer la méthode systématiquement. Evidemment si l'on a à priori une idée du type d'anomalie possible, la recherche peut être nettement simplifiée, car on peut utiliser un biaisage qui les rend plus fréquentes.

Ces considérations permettent donc de lever en général les derniers doutes que l'on peut avoir sur un résultat obtenu par Monte-Carlo, et qui constituent toujours son gros défaut.

VII - MAJORATION DE L'ECART QUADRATIQUE

Dans tout ce qui précède l'écart quadratique a été étudié expérimentalement, sauf dans le cas idéal où l'on pouvait prévoir la valeur $1/\sqrt{n}$. La difficulté commune à tous les calculs de Monte Carlo est de connaître l'incertitude réelle sur le résultat alors qu'on ne possède qu'une variance apparente parfois très inférieure à la variance totale lorsque la distribution ne suit pas une loi normale.

On peut seulement, comme nous l'avons vu, prolonger le calcul jusqu'à ce que la répartition semble normale, en s'aidant éventuellement de tests numériques [32]. Cette méthode est souvent valable, mais ne permet pas d'affirmer qu'il n'existe pas une histoire qui décalerait fortement la moyenne des résultats. Dans le chapitre précédent nous avons vu comment on peut les détecter.

Nous allons voir maintenant comment il est possible de fournir à priori dans notre cas des considérations sur la loi de répartition et sur l'écart quadratique, et même une borne supérieure de cet écart ce qui, si cette borne n'est pas trop grande, est d'un très grand intérêt car il s'agit alors d'une certitude.

Dans le cas simplifié d'un corps à section efficace constante le principe de notre méthode est d'obtenir des histoires ayant une forte probabilité d'atteindre les régions de mesure, avec un poids ne dépendant que du point de l'espace des phases où se fait la mesure. Si le résultat est la somme de n encaissements, on a alors $\sigma = \frac{1}{\sqrt{n}}$. La loi de répartition tend vers une loi de Gauss dont les propriétés sont connues, la valeur de n suffit donc pour étudier le résultat.

Dans un cas plus général l'élargissement de la variance est dû au fait que les poids des histoires ne sont plus constants, et ceci à cause d'un certain nombre d'anomalies dans les lois physiques que les biaisages ne peuvent représenter parfaitement (variation de la section efficace, découpages discrets, changement de milieu). L'erreur totale ainsi ajoutée est donc le produit d'un certain nombre d'erreurs élémentaires rencontrées au cours d'une histoire. Or si ce produit reste borné quelque soit l'histoire, on peut alors affirmer que l'écart quadratique sur les poids encaissés en un même point existe et varie en $\frac{1}{\sqrt{N}}$ pour N histoires, et la loi de répartition tend vers une loi de Gauss [5] [8].

Cas d'une section efficace variable

Nous allons considérer le cas d'un corps de section efficace variable représentée par un certain nombre de paliers en fonction de l'énergie. Dans ce cas les corrections de poids extrémales peuvent être calculées et fournissent ainsi une borne supérieure de σ .

Sur chacun des paliers les lois de biaisages sont correctes, les anomalies ne se présentent donc qu'aux changements de palier. Elles sont de 2 types :

- changement de Σ_T
- changement de la pondération en fonction de l'énergie (α)

$$\text{La correction totale est donc } C = \frac{\Sigma_{T_2}}{\Sigma_{T_2} - k\gamma} \cdot \frac{\Sigma_{T_1} - k\gamma}{\Sigma_{T_1}} \cdot \left(\frac{E}{E'}\right)^{(\alpha_1 - \alpha_2)}$$

Si l'on a $\Sigma_{T_2} > \Sigma_{T_1}$ C max est obtenu pour $\gamma = -1$

C min est obtenu pour $\gamma = +1$

et vice versa pour $\Sigma_{T_2} < \Sigma_{T_1}$

Pour $\alpha_2 > \alpha_1$ C max est 1

$$C \text{ min est } \left(\frac{E}{E'}\right)_{1 \text{ max}}^{(\alpha_1 - \alpha_2)}$$

le maximum du rapport $\frac{E}{E'}$ est soit la perte maximale

d'énergie par choc $\left(\frac{M+1}{M-1}\right)^2$ M étant la masse atomique, soit $\frac{E_1}{E_2}$, E_1 et E_2 étant

les limites du palier 2, lorsque ce rapport est inférieur au précédent.

Pour $\alpha_1 < \alpha_2$ C_{max} et C_{min} sont inversés.

On obtient donc en tout :

$$C_{\max} = \sum_{\Sigma_{T_{i+1}} > \Sigma_{T_i}}^i \left(\frac{\Sigma_{T_{i+1}}}{\Sigma_{T_{i+1}} + k} \cdot \frac{\Sigma_{T_i} + k}{\Sigma_{T_i}} \right) \cdot \sum_{\Sigma_{T_{i+1}} < \Sigma_{T_i}}^i \left(\frac{\Sigma_{T_{i+1}}}{\Sigma_{T_{i+1}} - k} \cdot \frac{\Sigma_{T_i} - k}{\Sigma_{T_i}} \right) \cdot \alpha_{k+1}^k \pi_{\alpha_k < \alpha_{k+1}} \left(\frac{A+1}{A-1} \right)^{2(\alpha_k - \alpha_{k+1})}$$

$$C_{\min} = \sum_{\Sigma_{T_{i+1}} > \Sigma_{T_i}}^i \left(\frac{\Sigma_{T_{i+1}}}{\Sigma_{T_{i+1}} - k} \cdot \frac{\Sigma_{T_i} - k}{\Sigma_{T_i}} \right) \cdot \sum_{\Sigma_{T_{i+1}} < \Sigma_{T_i}}^i \left(\frac{\Sigma_{T_{i+1}}}{\Sigma_{T_{i+1}} + k} \cdot \frac{\Sigma_{T_i} + k}{\Sigma_{T_i}} \right) \cdot \alpha_{k+1}^k \pi_{\alpha_{k+1} > \alpha_k} \left(\frac{A+1}{A-1} \right)^{2(\alpha_k - \alpha_{k+1})}$$

Le nombre de paliers étant obligatoirement fini, $C_{\max}$ et $C_{\min}$ ont toujours une valeur finie tant que k est inférieur à toutes les sections efficaces. Nous retrouvons ici le cas du trou de section efficace toujours difficile.

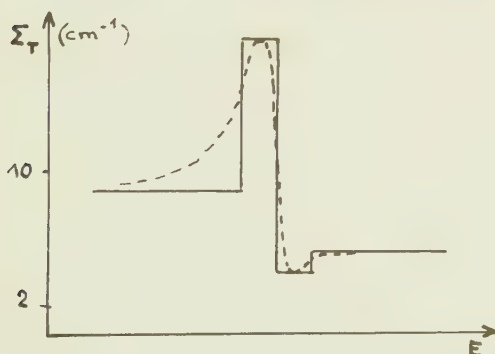
Mais dans le cas du biaisage des tirages lorsque $\Sigma_T - k < \varepsilon$ (chapitre V.3) la correction a toujours une valeur finie qui est de la forme :

$$\frac{\Sigma_{T_{i+1}}}{\Sigma_{T_{i+1}} - k\gamma} (1 - e^{(-\Sigma_T + k\gamma)l}) \cdot \frac{\Sigma_{T_i} - k\gamma}{\Sigma_{T_i}}, \quad l \text{ étant la distance du choc à la}$$

frontière.

Application numérique

Plaçons-nous dans le cas simple étudié précédemment (IV.6) où la section totale présentait 4 paliers (schématisation très grossière de la section efficace du fer), et $M = 50$.



Pour une valeur de $k = 1$ (trou de section efficace important) on trouve :

$$\frac{C_{\max}}{C_{\min}} = 50$$

Pour $k = 0.5$ $\frac{C_{\max}}{C_{\min}} = 7$

Ce résultat est intéressant car on peut alors affirmer que la probabilité d'une erreur supérieure à celle-ci est nulle. (Cette majorante est évidemment très large puisque la probabilité de ces histoires extrêmes est presque nulle).

On pourrait de même évaluer l'erreur due aux chocs inélastiques, toujours faible car elle n'est due qu'à l'écart entre l'énergie exacte après choc et l'énergie moyenne du palier.

(On remarque aussi d'après les expressions de $C_{\max}$ et $C_{\min}$ que si l'on a 2 sauts successifs dans le même sens pour $\sum \tau$ la correction totale ne dépend pas du palier intermédiaire, la majorante calculée ci-dessus est donc également valable pour la forme de section efficace beaucoup plus réaliste tracée en pointillés).

Dans le cas général d'un milieu homogène il est donc toujours possible de fournir une borne supérieure σ de l'erreur sur une histoire, et σ est alors majoré par $\frac{\sigma}{\sqrt{N}}$ pour N histoires.

Dans le cas de plusieurs milieux le calcul est beaucoup plus complexe car la distance ne varie pas de façon monotone comme l'énergie, et une frontière peut être traversée plusieurs fois alors qu'un saut de section efficace est obligatoirement franchi une seule fois. Mais ce nombre est toujours fini compte tenu de la perte d'énergie non nulle due à chaque changement de direction, car les problèmes admettent toujours un seuil en énergie. Les résultats seraient vraisemblablement assez grands et de moindre intérêt pratique, mais permettent d'affirmer que la loi de répartition tend bien vers une loi de Gauss.

VIII - EXTENSION POSSIBLE AUX PROBLEMES TRIDIMENSIONNELS. EXEMPLE

Le principe de la méthode peut s'appliquer aux problèmes tridimensionnels, [18]
[24] avec des biaisages du même type que ceux des traversées de frontières, car il est toujours possible de trouver une direction d'intérêt (pouvant dépendre du point de choc) qui sera celle du vecteur $\vec{k}$, et un domaine plus étendu que celui du problème dans lequel on résout $\int K^* = 1$.

Dans un cas très général la complexité du calcul devient très grande. Mais il existe des problèmes se prêtant facilement aux biaisages : c'est le cas d'une géométrie qui se reproduit à l'aide de transformations géométriques ; il suffit alors d'un petit nombre de précalculs pour obtenir les biaisages de tous les chocs.

En particulier nous avons traité le problème d'un tuyau cylindrique long contenant une plaque en forme d'hélicoïde à une ou plusieurs branches = les biaisages sont établis pour les points d'un rayon et d'un arc de cylindre, tous les autres s'en déduisent par translation, rotation ou symétrie. La fonction d'importance est évidemment $e^{\vec{k}z}$, $\vec{k}$ étant parallèle à l'axe du cylindre. Là encore l'utilisation de ces biaisages a permis de réduire la variance dans des proportions très importantes (21) . Pl. (12)

IX - UTILISATION DE LA METHODE POUR RESOUDRE LE PROBLEME ADJOINT

Certains problèmes sont résolus avantageusement en considérant le problème adjoint : c'est le cas où la réponse cherchée est peu étendue (en probabilité) vis-à-vis de la source. C'est le cas inverse de celui que nous avons considéré jusqu'à présent (réponse très étendue et située à grande distance de la source). On trouve alors le résultat en utilisant la réponse cherchée comme source, un noyau K^{-1} adjoint de K pour le calcul, et la source comme réponse [19] [28] .

Or si e^{kz} est une solution asymptotique du problème adjoint, on peut également dire que e^{-kz} est solution asymptotique du problème direct (adjoint de l'adjoint) et on voit donc que tous les biaisages décrits ci-dessus restent utilisables pour traiter avec succès le problème adjoint.

En effet pour les chocs élastiques les biaisages sont effectués avec une anisotropie et une section efficace supposées constantes sur chaque palier, et on suppose qu'après choc on ne quitte pas le palier, donc avec le noyau adjoint les préliminaires sont rigoureusement les mêmes. Et dans le calcul de Monte Carlo on aura seulement une correction de poids supplémentaire due au fait que l'anisotropie correcte est celle de l'énergie après choc et non avant.

Pour les chocs inélastiques la présentation sous forme matricielle s'adapte aussi très facilement au problème adjoint, il suffit d'échanger lignes et colonnes, puis d'effectuer le biaisage de la même façon :

$$\Sigma_{inel}(E') = \sum_E \Sigma_{inel}(E \rightarrow E') \frac{A(E')}{A(E)} \Delta E$$

Les paliers seront traités dans l'ordre inverse (en commençant par les énergies élevées) et la valeur de k sera $-k$. Le cas de l'hydrogène resterait un problème difficile à réétudier entièrement. Mais pour tous les autres cas on voit qu'on a là une méthode capable de fournir la solution du problème adjoint avec des performances semblables à celles du problème direct.

On peut même envisager une méthode encore plus élaborée qui serait de traiter d'abord grossièrement le problème adjoint, et de se servir des résultats obtenus pour biaiser la source du calcul direct, afin que tous les neutrons émis aient la même contribution à la réponse finale.

X - CONCLUSION

A partir de considérations théoriques nous avons donc abouti à la fabrication d'un instrument de calcul d'une grande utilité pratique, concurrençant valablement des codes les plus élaborés utilisant d'autres méthodes de calcul. Nous avons vu aussi que les méthodes de Monte Carlo, malgré leur origine semi-empyrique, ont un domaine d'application très étendu si l'on peut les adapter au problème que l'on cherche à résoudre, et notre exemple a mis en évidence leur puissance et leur intérêt.

ANNEXE I

DESCRIPTION RAPIDE DES DIVERS PROGRAMMES REALISES AU COURS DE CETTE ETUDE

MINI-MONO (S. Katz, J.C. Nimal)

Programme traitant la propagation de neutrons de section efficace constante, en utilisant la transformation exponentielle (biaisage des distances parcourues). Géométrie plane. IBM 70 94

BACCARA 1 (J.M. Lanore) IBM 70 94

Propagation de neutrons de section efficace constante. Géométrie plane ou sphérique.

1ère partie : prétabulation des biaisages angulaires (sans tenir compte de la direction avant choc)

2ème partie : calcul de Monte Carlo à l'aide des matrices calculées précédemment.

BACCARA 2 (J.M. Lanore) IBM 70 94

Semblable au précédent mais le biaisage de la déviation tient compte de la direction avant choc.

BACCARA 3 (J.M. Lanore) IBM 70 94

1ère et 2ème partie identiques à Baccarat 1.

3ème partie : itération sur les valeurs de k en fonction du nombre d'encaissements obtenu.

CAD (J.M. Lanore) IBM 7094 et 360

Etude de la variance : calcule les σ apparents et la valeur moyenne de $\sigma \sqrt{N}$ sur les résultats des calculs Baccara ou Poker.

POKER 1 (J.M. Lanore) IBM 7094

Propagation des neutrons dans un milieu de section efficace quelconque (problèmes concrets).

La géométrie est plane ou sphérique.

La source (de surface seulement) est quelconque en énergie.

Les neutrons sont traités un par un, de la source à la sortie.

Poker 1 est constitué par les sous-programmes suivants :

SOURCE programme principal : lecture des entrées, biaisage des sources, tirage des neutrons source et mise en mémoire des neutrons après splitting. Sortie des résultats.

PRELI calcul et mise en mémoire des matrices de biaisage.

DIST calcul d'un choc : choix de la direction et de la distance.

On obtient les flux et les courants sur des surfaces de mesure fixées arbitrairement.

Temps moyen pour un problème type (énergie de 18 MeV à l'énergie thermique) :

3 à 5 minutes de 7094.

POKER 2 (J.M. Lanore) IBM 360/91

Permet de traiter en géométrie plane ou sphérique la plupart des problèmes concrets d'atténuation neutronique. La source est quelconque en géométrie et en énergie.

Le milieu considéré peut être constitué d'un nombre quelconque de lames (ou couches sphériques) de composition différente.

La structure du programme est la suivante :

SOURCE C'est le programme moniteur, qui effectue le biaisage et les tirages des sources et les appels des divers sous-programmes :

DONNE Lecture et reclassement des sections efficaces.

JEU Calcul de la pondération en énergie et des matrices de biaisage angulaire.

MISE Biaisage des probabilités des diverses interactions.

CHOC Choix de l'énergie et de la direction après choc.

TRANSF Choix de la distance parcourue entre 2 chocs et traitement des frontières.

GEOM Calcul des coordonnées du neutron après choc.

ENCA Encaissement du poids lors des chocs ou des traversées de surfaces de mesure.

RANDOM Tirage d'un nombre entre 0 et 1.

SORTIE Impression et perforation des résultats.

On obtient comme précédemment les flux et les courants sur les surfaces de mesure, les flux moyens entre 2 surfaces et les réponses de détecteur demandées.

Temps moyen pour un cas type (4 compositions, énergie de 18 MeV aux thermiques, atténuation totale de 10^{-4}) 3 à 5 minutes de 360/91.

PREPOKER (B. Nimal) IBM 360/50

Programme permettant la tabulation des données neutroniques à partir d'une bande bibliothèque de sections efficaces (GENDA) 5 minutes de 360/50 pour 4 compositions.

POKER 3 (J.M. Lanore) IBM 360/91

Identique à Poker 2 sauf pour le sous-programme CHOC qui effectue les tirages en tenant compte des frontières.

Les entrées et sorties sont les mêmes.

Le temps de calcul est 1,5 fois celui de Poker 2.

ANNEXE II

(Détails de programmation)

Afin de ne pas perdre les avantages de la méthode de calcul la programmation a été effectuée de façon à minimiser aussi à la fois le temps de calcul et l'encombrement en mémoire.

Temps de calcul

Pour éviter les lectures sur bande ou disque toujours longues toutes les données sont placées en mémoire rapide.

Le temps de calcul à minimiser est surtout celui d'un choc, qui se répète un très grand nombre de fois, plutôt que les préliminaires souvent négligeables comme durée, aussi on effectue un grand nombre de précalculs des grandeurs intervenant dans le calcul d'un choc (exponentielles, logarithmes, polynômes de Legendre, etc...).

Les probabilités des divers évènements sont cumulées (comme nous l'avons expliqué ci-dessus) en commençant si possible par l'évènement le plus probable.

On a souvent à chercher l'indice d'une valeur dans un tableau d'environ 200 quantités (énergie par exemple). Pour cela au lieu de comparer cette valeur à toutes celles du tableau en commençant par la 1ère, on la compare à la valeur d'indice central, puis à la valeur centrale de la moitié choisie, etc... le nombre moyen d'opérations est très réduit (7 au lieu de 100).

D'une façon générale on a cherché à éliminer le plus possible les appels de sous-programmes (en les regroupant) et les opérations les plus lentes (exponentielles en particulier).

Encombrement

La plupart des tableaux à plusieurs indices sont remplacés par des empilements continus, ce qui permet éventuellement d'augmenter une dimension au détriment d'une autre sans créer de vide dans les tableaux.

On utilise aussi de nombreux recouvrements de mémoire : les mémoires utilisées dans les précalculs sont réutilisées pour les encaissements par exemple. Les sous-programmes eux-mêmes reprennent les mêmes emplacements (structure d'overlay).

Les neutrons sont suivis un par un de la source à leur disparition (sortie ou roulette russe) et non pas choc par choc pour toute une population, c'est évidemment ce qui tient le moins de place.

Cependant lors d'un fractionnement il faut mettre en mémoire les neutrons obtenus afin de les reprendre ensuite. Pour effectuer cette opération le plus économiquement on procède de la façon suivante :

- lors d'un premier fractionnement le neutron mis en réserve le plus près de la source prend le numéro 1, le suivant le n° 2, jusqu'au numéro i et l'on poursuit l'histoire de celui qui est allé le plus loin.
- s'il y a de nouveau fractionnement le 1er déposé prend le n° i+1 et ainsi de suite jusqu'à j.
- quand le neutron suivi sort ou est tué on reprend le neutron n° j, s'il laisse des descendants ils prennent les n° j, j+1 ...

Ce système permet

- 1° de ne laisser aucune place vide dans la liste des neutrons en réserve
- 2° de reprendre d'abord celui qui est le plus près de la sortie, donc celui qui laissera le moins de descendants.

Ainsi l'emplacement en mémoire des neutrons splittés reste minimal.

L'encombrement total du programme est de 360 K, et ses dimensions sont suffisantes pour traiter tous les problèmes courants de protection (12 compositions différentes, 30 régions, 15 éléments, 200 bandes d'énergie).

La programmation a été effectuée en Fortran. Il serait probablement possible d'améliorer encore le temps de calcul et l'encombrement, mais le gain éventuel ne justifie pas cette opération, les performances actuelles du programme étant très satisfaisantes.

REFERENCES

- [1] Symposium on Monte Carlo Methods (1954)
- [2] R. FORTET
Méthode de Monte Carlo (1957)
- [3] G. GOERTZEL et M.H. KALOS
Monte Carlo methods in transport problems
Progress in Nuclear Energy. Serie 1, 2, 315 (1958)
- [4] J. SPANIER
Monte Carlo methods and their application to neutron transport problems.
WAPD 195 (1959)
- [5] Cours de R. FORTET
Calcul des probabilités (1959)
- [6] J.P. MILLOT (Thèse)
Etude de la diffusion des neutrons rapides. Section efficace de déplacement (1962)
- [7] SIVAGNANAM
Programme Sided
Note CEA à paraître
- [8] Cours de G. DARMOIS
Calcul des probabilités (1962)
- [9] M.H. KALOS
Importance sampling in Monte Carlo shielding calculations.
1) Neutron penetration through thick hydrogen slabs NSC 16 227-234 (1963)

- [10] M.H. KALOS
On the estimation of flux at a point by Monte Carlo
NSE 16, 111-117 (1963)
- [11] M. LEIMDORFER
On the transformation of the transport equation for solving deep penetration problems by Monte Carlo Method
FOA 4, rapport A, 43 61- 411 (February 1964)
- [12] M. LEIMDORFER
On the use of Monte Carlo methods for calculating the deep penetration of neutrons in shields
FOA 4, rapport A, 4361-411 (Mars 1964)
- [13] J.C. NIMAL, J. RASTOIN
Méthodes de Monte Carlo
Note CEA, 533 (Avril 1965)
- [14] B. ERIKSSON
On the use of importance sampling in particle transport problems
AE 190 (Juin 1965)
- [15] F.H. CLARK
The exponential transform as an importance sampling device
Arview, OR NL, RISC, 14
- [16] G. BRANDICOURT, J. CULAMBOURG
Code Niobe. Description et utilisation
Note CEA 583 (Janvier 1966)
- [17] J. BRISBOIS, S. KATZ
Sidef version 2
Note CEA à paraître
- [18] C. DEVILLERS, P. LAFORE et J.C. NIMAL
Programme Zeus 2 Monte Carlo monocinétique tridimensionnel
Note CEA 1350.

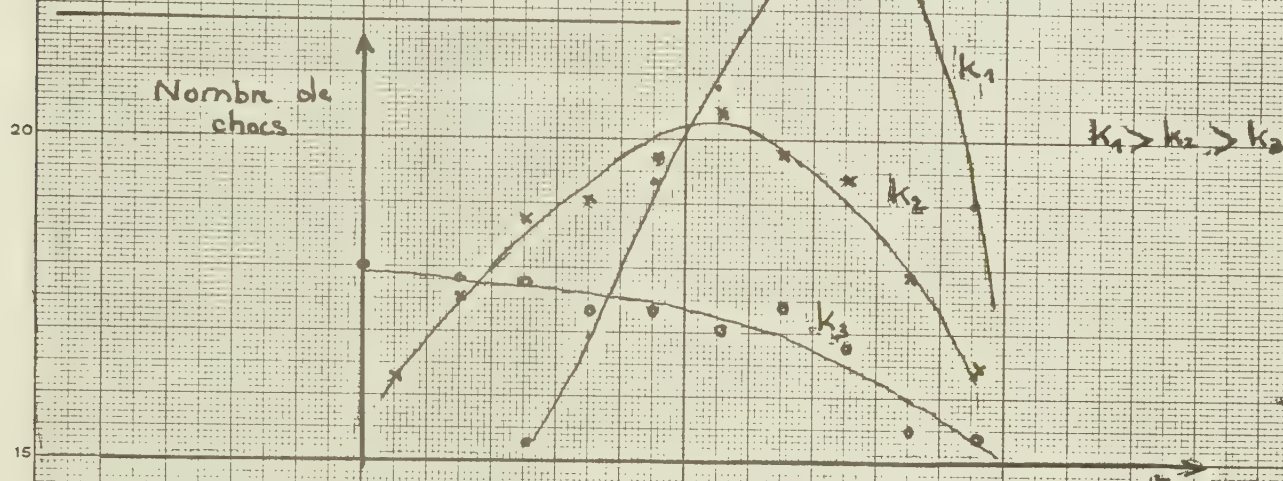
- [19] R.R. COVEYOU, Y.R. CAIN et K.J. YOS
Adjoint and importance in Monte Carlo Application
N.S.E, 27, 219-234 (1967)
- [20] C. DE VILLERS, S. KATZ et J.C. NIMAL
Quelques remarques sur la pondération dans les méthodes de Monte Carlo
Note CEA 644 (Juin 1967)
- [21] C. DE VILLERS et J.M. LANORE
Programme Tournesol III
Rapp. CEA R 3196 (1967)
- [22] J.M. LANORE
Principes théoriques d'une méthode de pondération dans les calculs de Monte Carlo
Note CEA N 817 (Sept. 1967)
- [23] J.M. LANORE
Quelques applications d'une méthode de pondération dans les calculs de Monte Carlo.
Note CEA N 825 (Oct. 1967)
- [24] F. GERVAISE et M.M. D'HOMBRES
Variante du programme Zeus appliqué à des problèmes de tunnels
Note CEA 933 (Mai 1968)
- [25] J.M. LANORE
Utilisation d'une méthode de Monte Carlo pour le calcul de la propagation des neutrons à grande distance
Note CEA N 934 (Mai 1968)
- [26] J.M. LANORE
Application du programme Poker à la propagation des neutrons dans l'eau, le fer et les mélanges fer-eau.
Note CEA N 952 (Juin 1968)
- [27] J.M. LANORE
Programme Poker description et utilisation
Note CEA 1352

- [28] B. ERIKSSON, C. JOHANSSON, M. LEIMDORFER et M.H. KALOS
Monte Carlo integration of the adjoint neutron transport equation
N.S.E 37, 410-422 (1969).
- [29] G. BRANDICOURT, J. CULAMBOURG et J.C. LE RALLE
Point des études sur la protection supérieure du réacteur Phénix
Note CEA 1349.
- [30] J.M. LANORE
Etude de la variance d'un calcul de Monte Carlo application à la pondération
Note CEA N 1096 (Avril 1969)
- [31] J.M. LANORE
Propagation des neutrons dans un lamellage fer-eau programme Poker 3
Note CEA N 1195 (Oct. 1969)
- [32] F. GERVAISE
Programme ELF neutrons
N. CEA 1255 (février 1970)
- [33] B. NIMAL
Etude de l'atténuation des neutrons rapides dans un lamellage fer-eau
Thèse CNAM à paraître
- [34] J. BOISVERT
Thèse de 3ème cycle. à paraître
- [35] J.M. LANORE
Protection supérieure de Phénix. Comparaison des codes Poker et Niobe
Note CEA 1351.

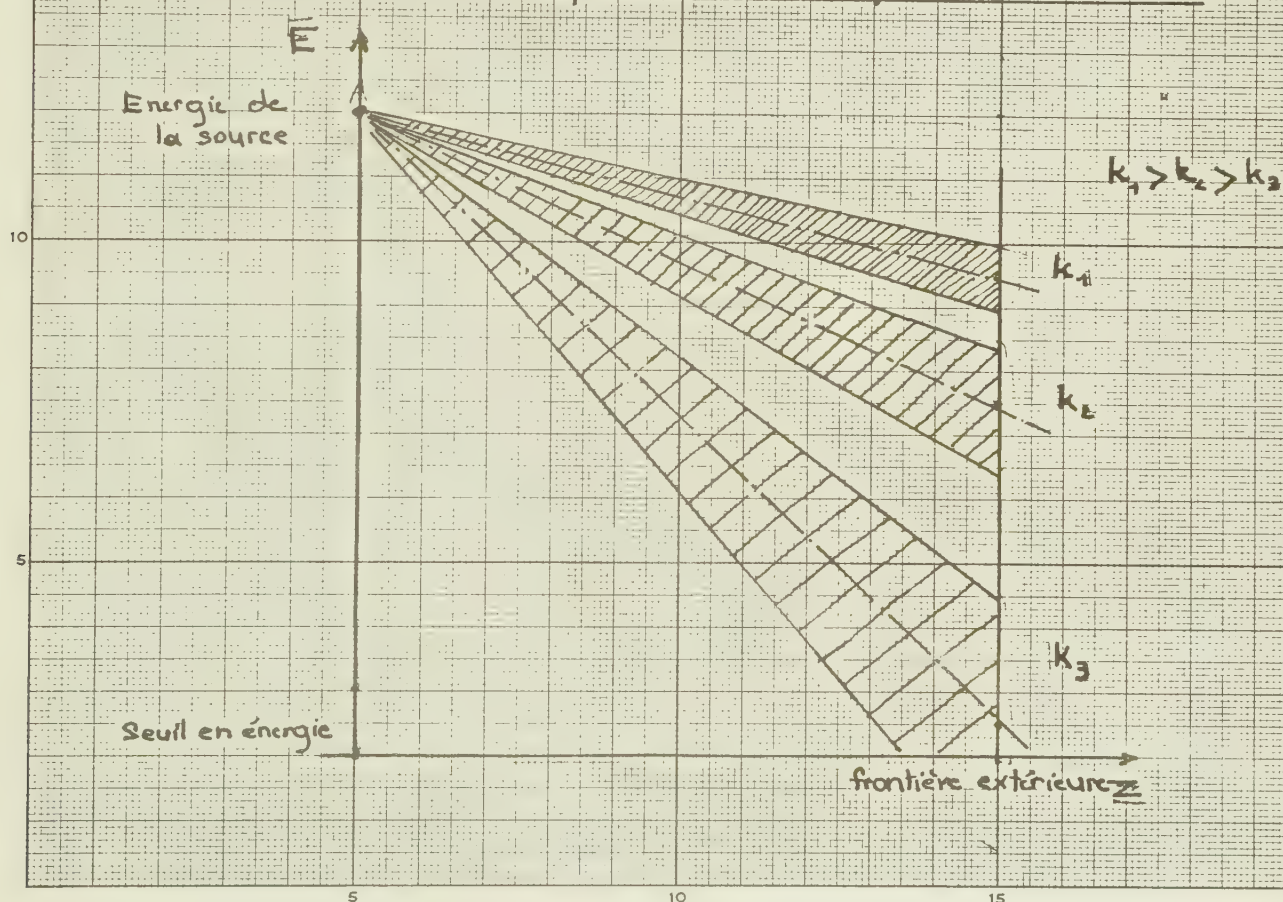
Manuscrit reçu le 10 décembre 1970

PLANCHE II

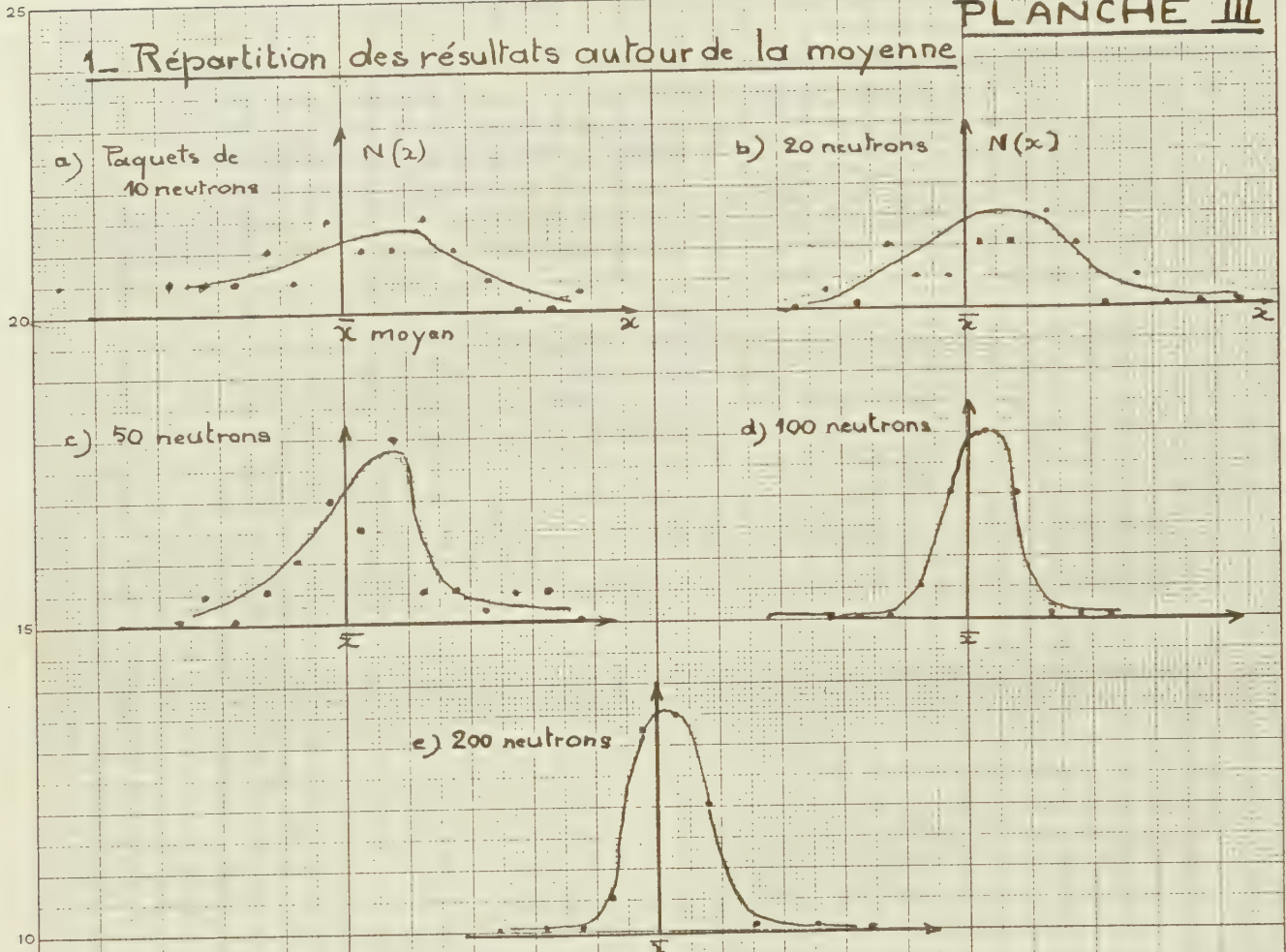
1. Répartition du nombre de chocs en fonction de l'énergie à une distance donnée pour 3 valeurs de k et un même nombre de neutrons



2. Zone optimisée dans l'espace des phases pour 3 valeurs de k



1- Répartition des résultats autour de la moyenne



2- Variations de l'écart quadratique apparent

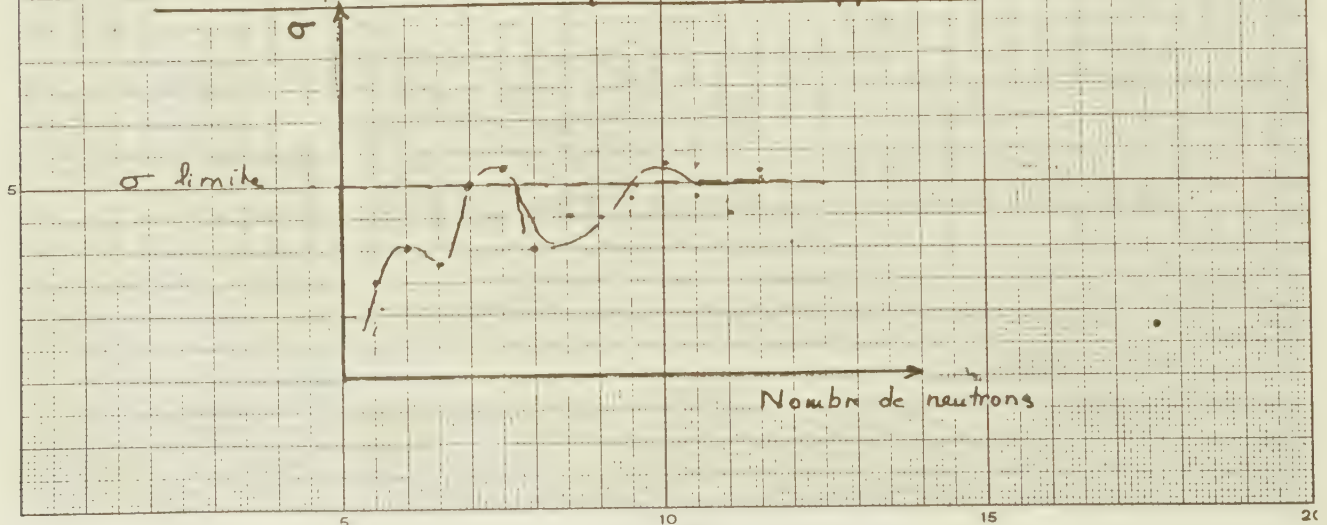
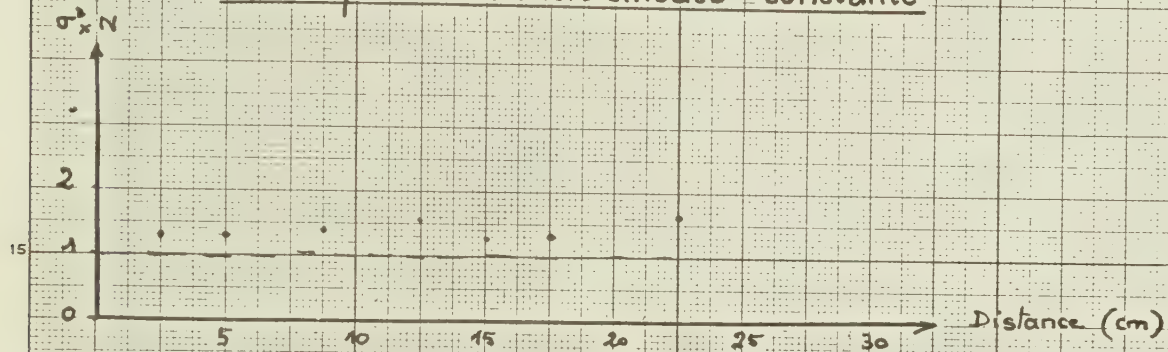


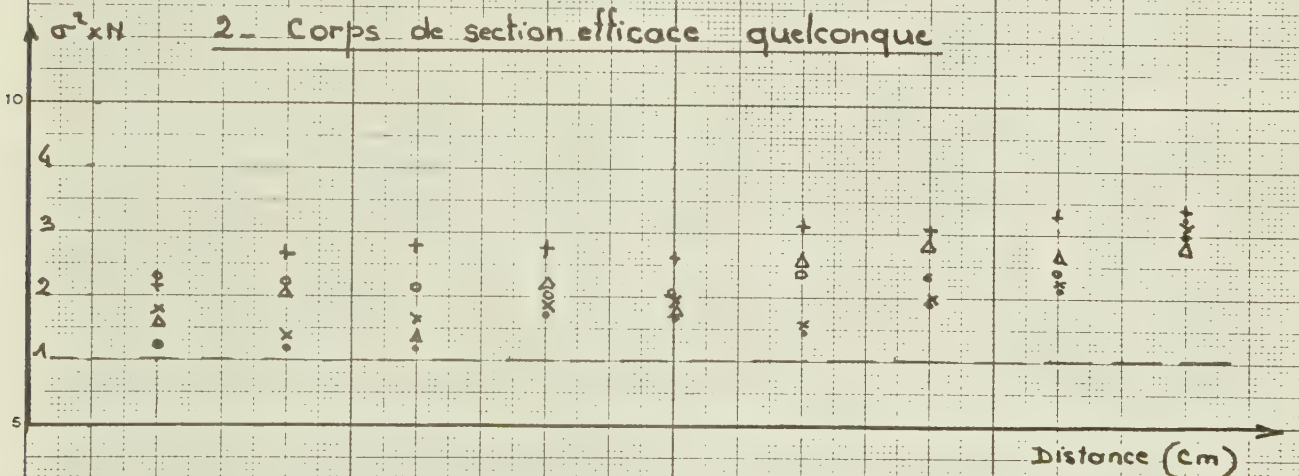
PLANCHE IV

VARIATIONS DU PRODUIT $\sigma^2 \times N$ EN FONCTION DE LA DISTANCE A LA SOURCE

1- Corps de section efficace constante



2- Corps de section efficace quelconque



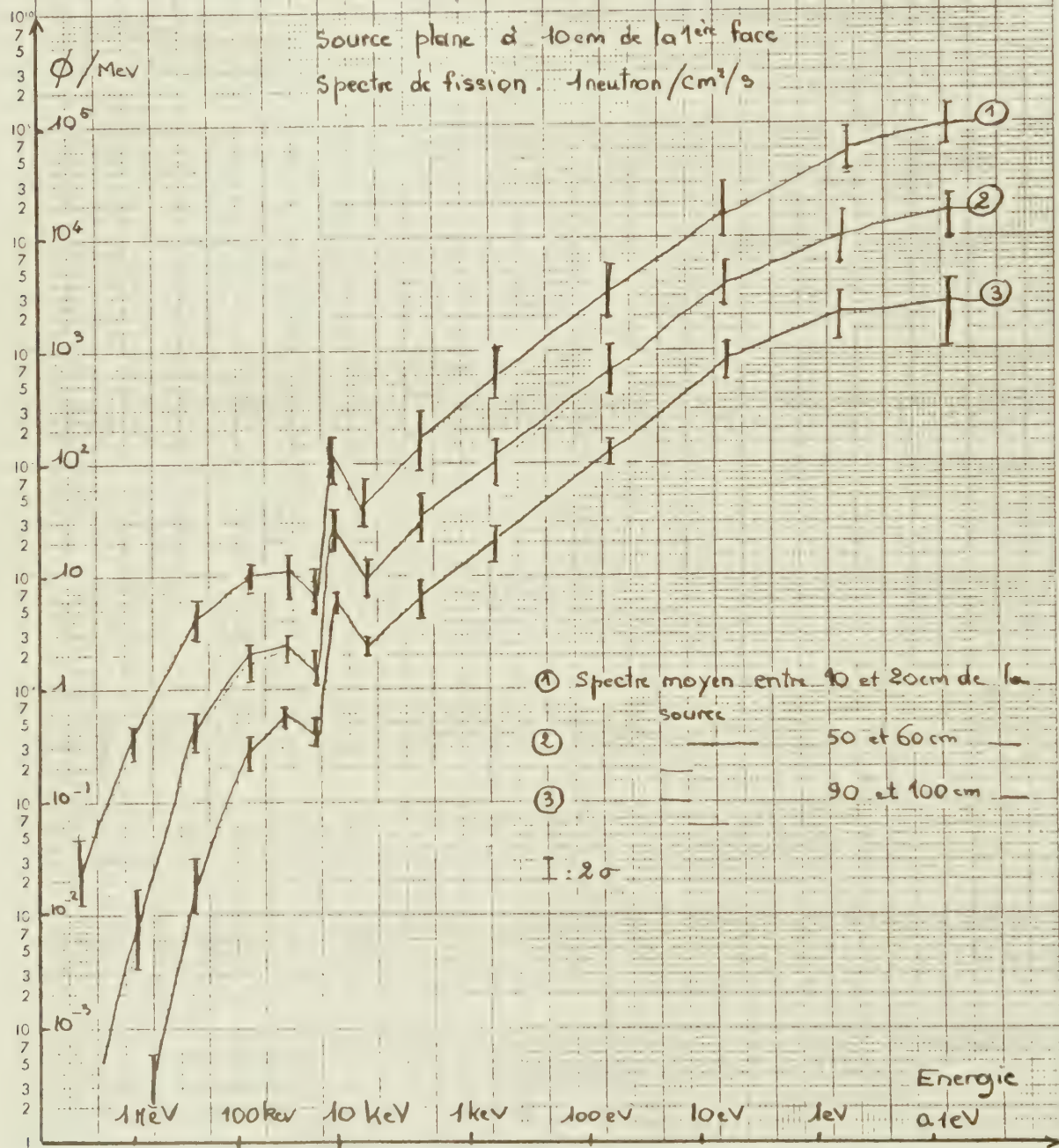
groupe d'énergie 1 (h¹⁰⁰ énergies)

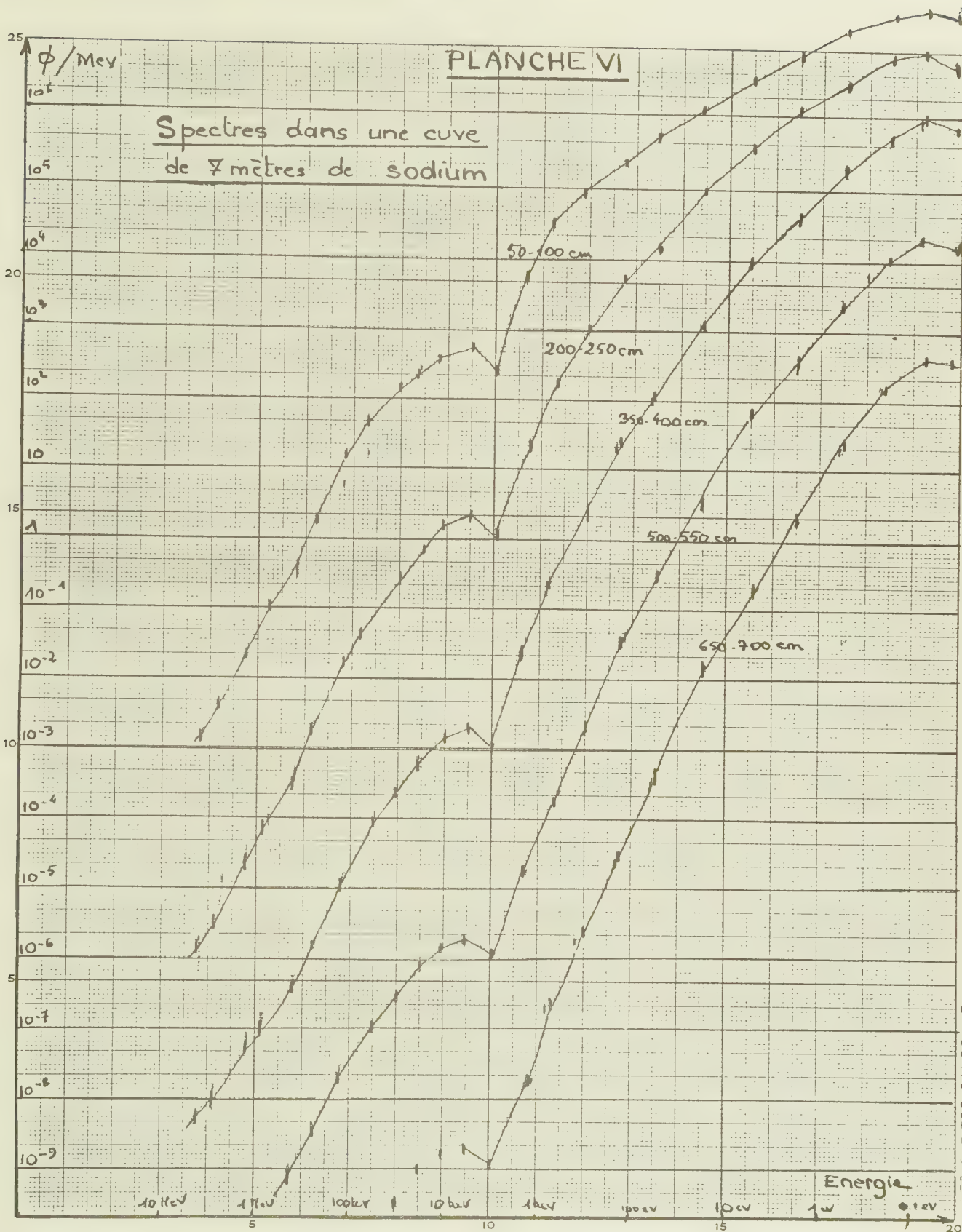
•	—	2
x	—	3
Δ	—	4
o	—	5
+	—	

PLANCHE V

Spectres dans une plaque de fer d'épaisseur 1 mètre 10

Source plane à 10cm de la 1^{ère} face
Spectre de fission. 1 neutron/cm²/s

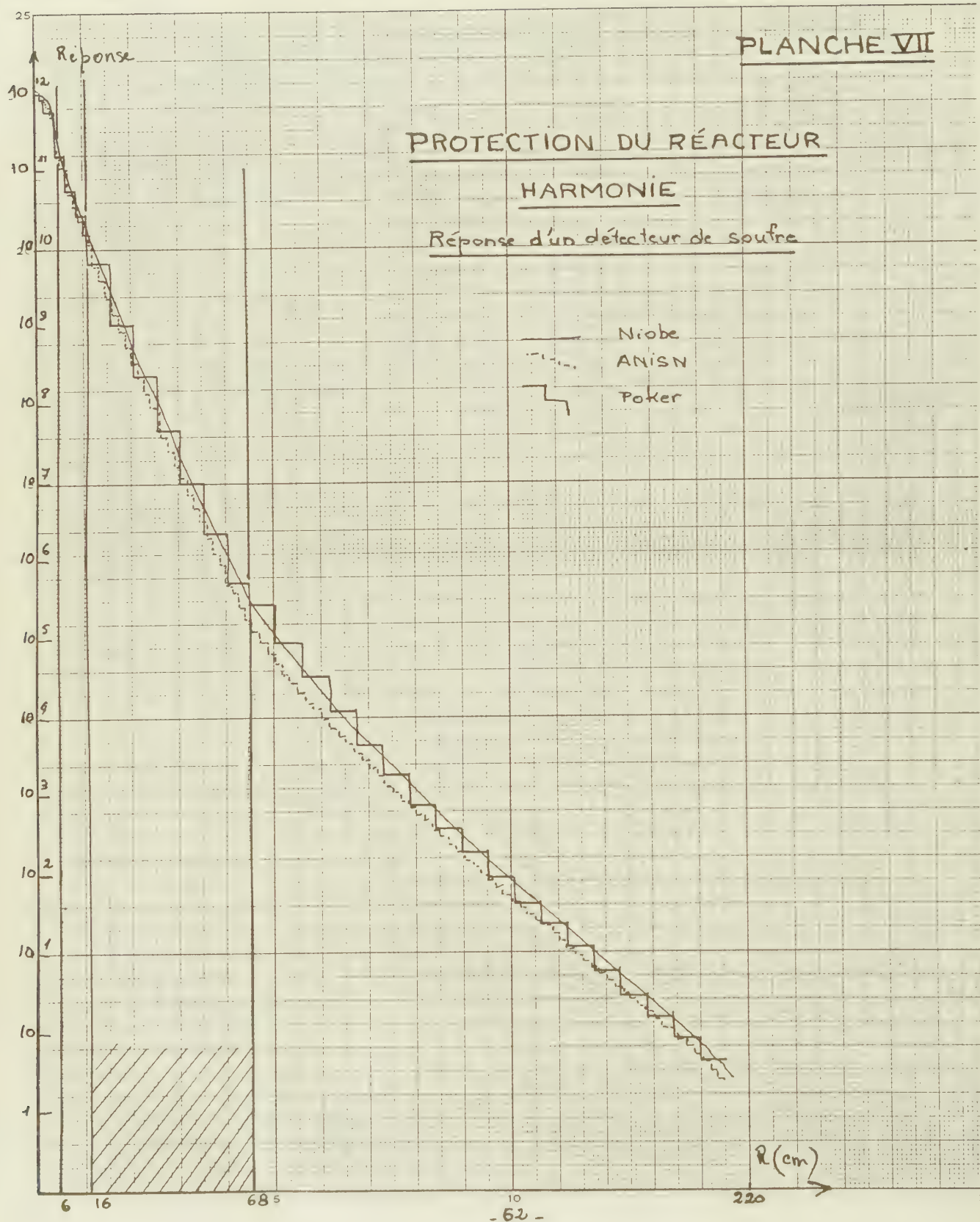




PROTECTION DU RÉACTEUR

HARMONIE

Réponse d'un détecteur de soufre



PROTECTION D'UN RÉACTEUR

A EAU LÉGÈRE

Flux de fission équivalent Rhodium

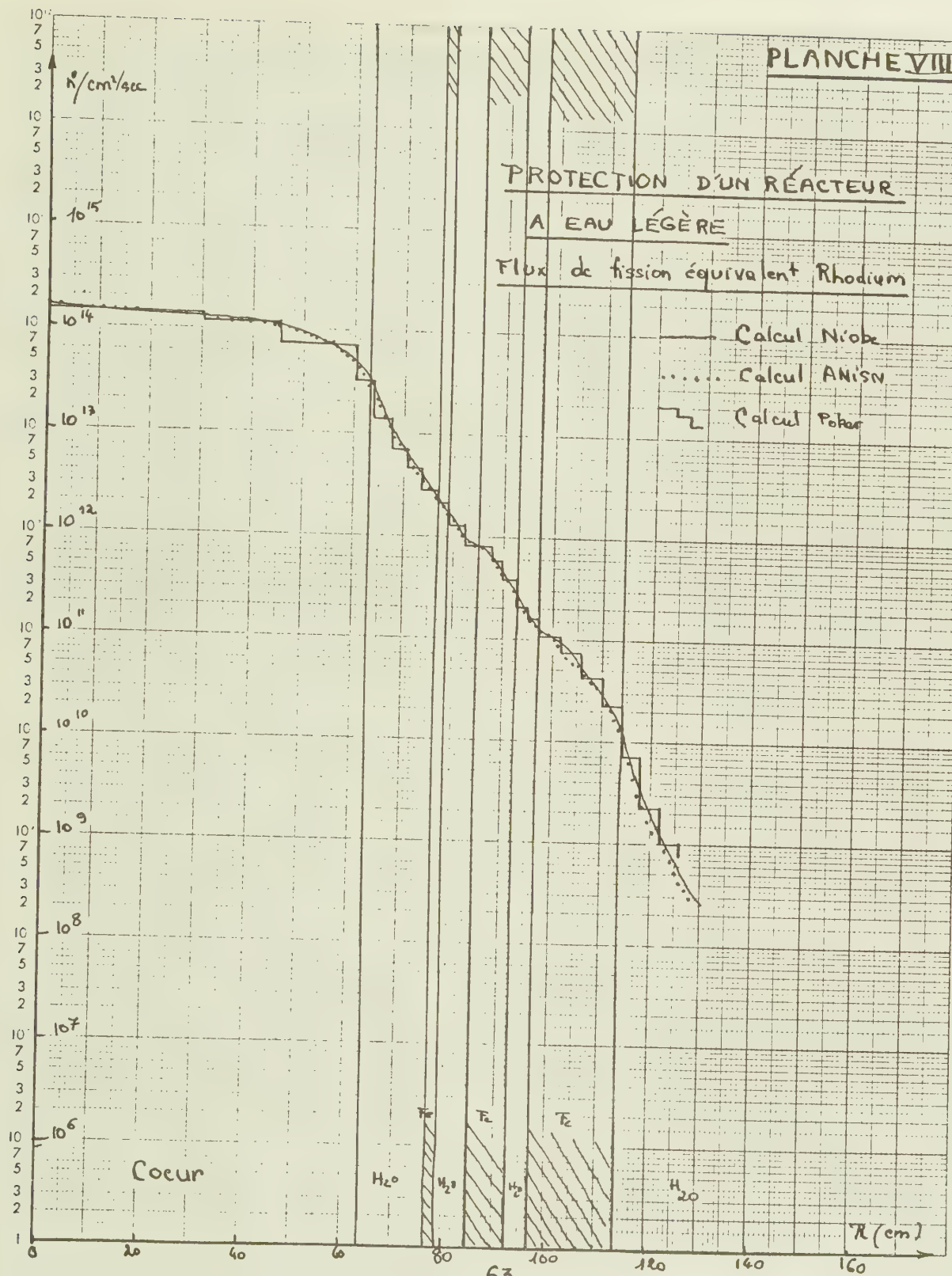


PLANCHE IX

PHÉNIX

PROTECTION SUPÉRIEURE

Réponse d'un détecteur Fe 54 (n.p) Mn 54

Cas d'une protection
en graphite lourd

Cas d'une protection
en acier inox

Calcul
Potter
Niobe

Potter
Niobe

2σ

↕

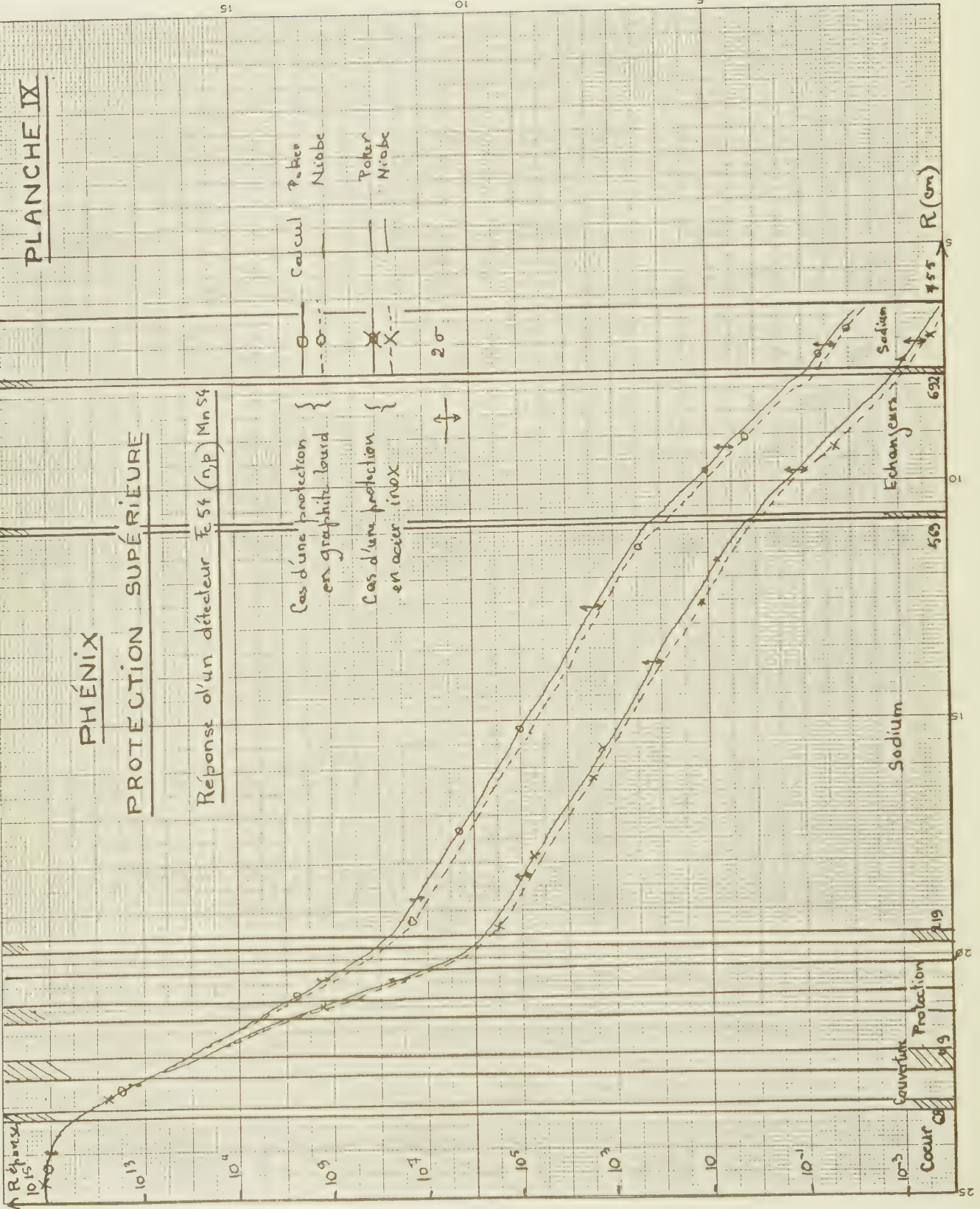
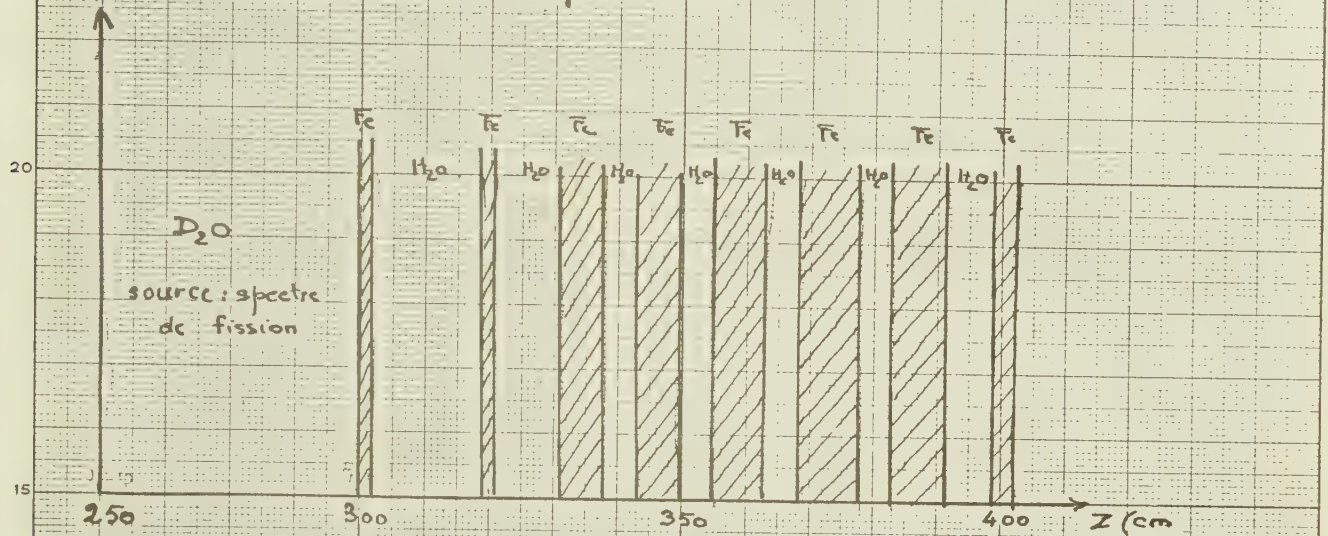
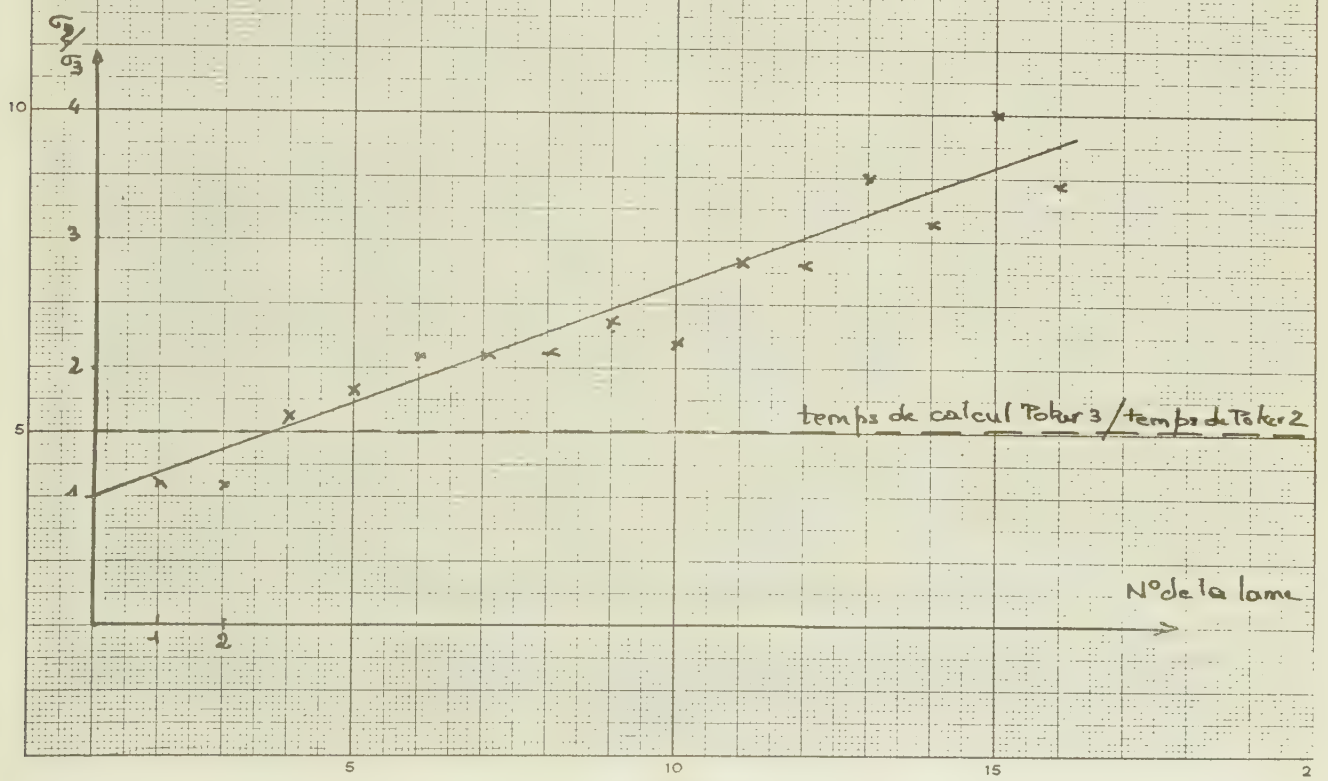


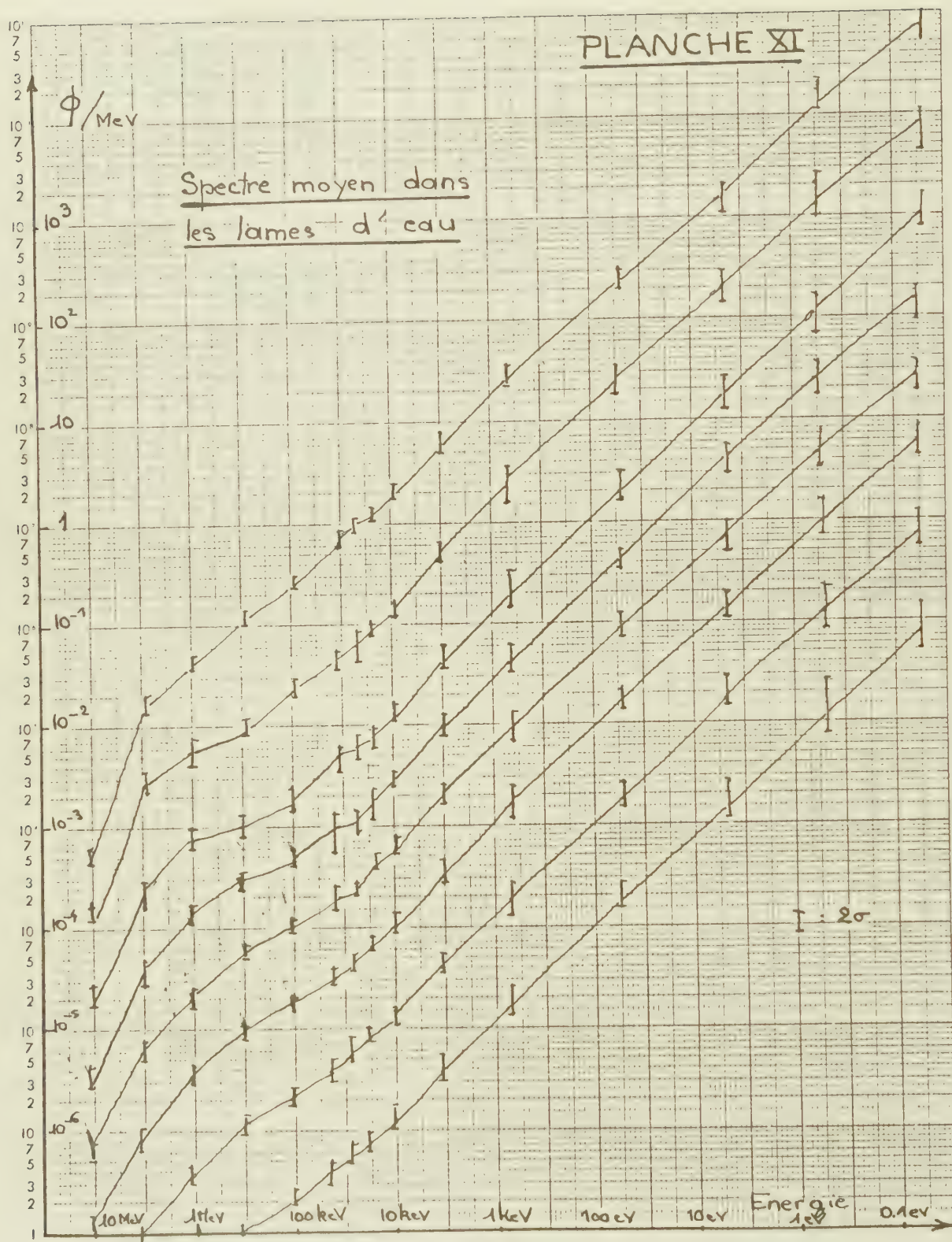
PLANCHE X

1 Géométrie du problème



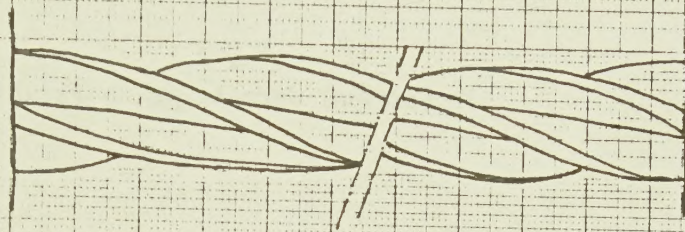
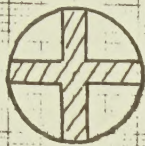
2 Gain du programme Tokier 3 par rapport à Tokier 2



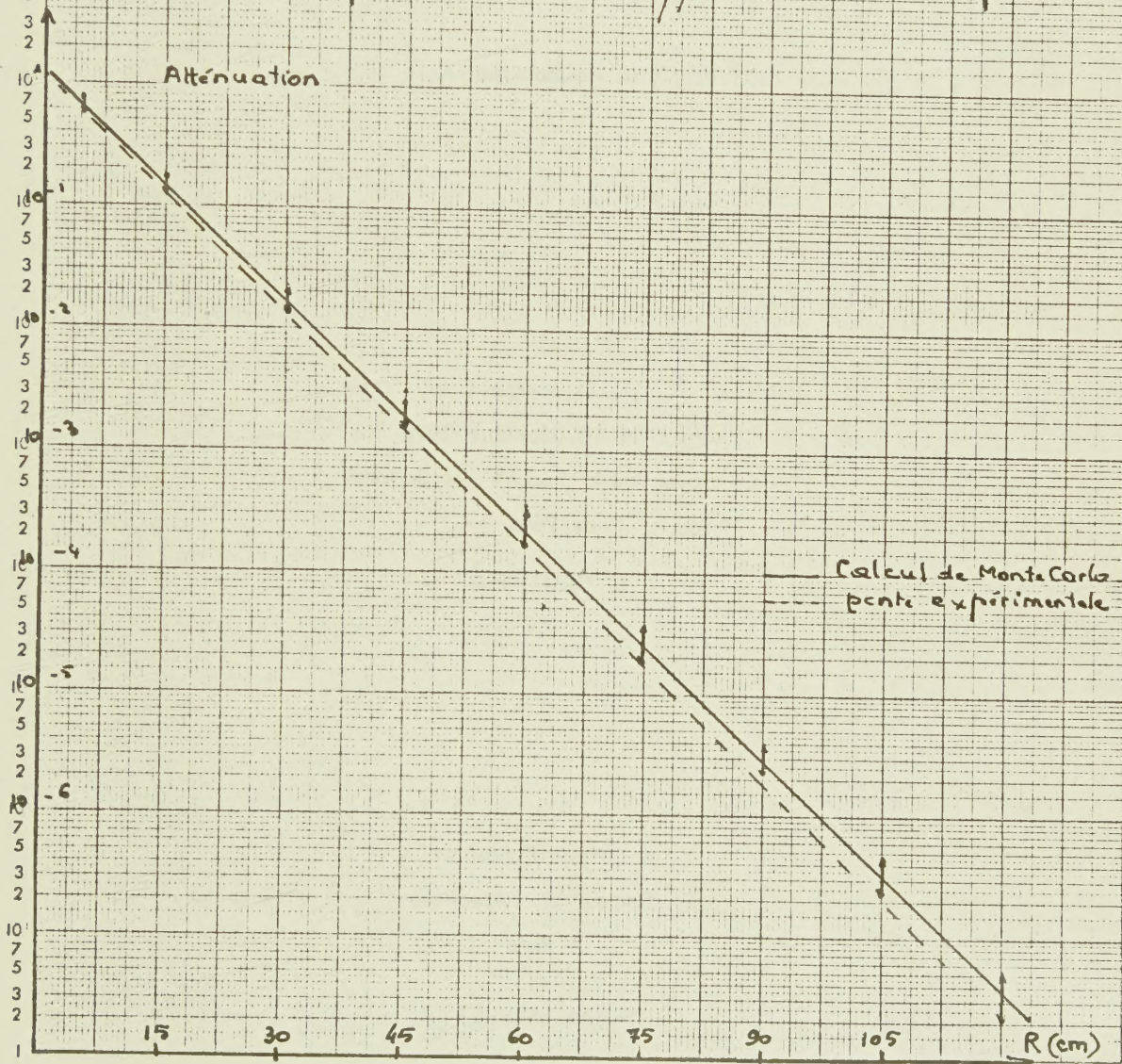


PROPAGATION DES NEUTRONS THERMIQUES
DANS DES FAUSSES CARTOUCHES D'ACIER EN HÉLICE

Shéma du dispositif



Atténuation



DEUXIEME THESE

Propositions données par la Faculté

Nombres Pseudo-Aléatoires

Vu et approuvé

Paris, le 16 décembre 1970

Le Doyen de la Faculté des Sciences
de Paris

L. GAUTHIER

Vu

et permis d'imprimer

Le Recteur de l'Académie
de Paris

Robert MALLET

